

# **Simulación multiescala de un Aluminio fisurado implementando un método que integre MD y FEM**



"VIGILADA MINEDUCACIÓN"

**Miguel José Pacheco Agámez**

**UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA  
FACULTAD DE INGENIERÍAS  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA  
MAESTRÍA EN INGENIERÍA MECÁNICA  
Montería, 2022**



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



**SIMULACIÓN MULTIESCALA DE UN ALUMINIO FISURADO IMPLEMENTANDO UN  
METODO QUE INTEGRE MD Y FEM**

**MIGUEL JOSÉ PACHECO AGÁMEZ**

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:  
**MAGÍSTER EN INGENIERÍA MECÁNICA**

Director:

**VALERY JOSÉ LANCHEROS SUÁREZ, M.SC**

Codirector:

**WILMER VELILLA DÍAZ, PH.D**

Línea de Investigación:

**DISEÑO**

Grupo de Investigación:

**I.C.T**

**UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA  
FACULTAD DE INGENIERÍAS  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA  
MAESTRÍA EN INGENIERÍA MECÁNICA  
Montería, noviembre, 2022**



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



## NOTA DE ACEPTACIÓN

---

---

---

---

Valery Lancheros Suarez

Wilmer Velilla Díaz

Emigdio Mendoza Fandiño

Abraham Arenas Tawil



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



***Dedicatoria***

*A mis padres Luis Carlos Pacheco y Saudith Agámez por sembrar en mi la semilla del esfuerzo, el trabajo duro y la educación como pilares fundamentales para mi formación personal, profesional y la transformación de mi vida. A mis hermanos y familiares por el apoyo incondicional y por sus valiosos consejos en esta etapa.*

*A Adriana Lucía por su amor desinteresado, por su apoyo incondicional y por la comprensión de tantos momentos difíciles en los que mi mente estuvo ausente.*

*Finalmente, agradezco a Dios por ser mi refugio y por siempre mostrarme el camino para lograr esta meta.*



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



## Agradecimientos

Agradezco a la Universidad de Córdoba y a su cuerpo docente por impulsar el desarrollo de la región a través de la formación de capital humano y especialmente por contribuir a mi formación disciplinar como Magister haciendo siempre énfasis en las buenas prácticas para el desarrollo del conocimiento y la investigación.

Agradezco a mi director de tesis Wilmer Velilla Díaz por su guía en el desarrollo de esta investigación, por sus aportes y por su disposición para discutir y debatir los resultados a lo largo de estos años. Siempre es bueno para la formación de conocimiento, debatir con alguien que muestra interés por los hallazgos, aunque parezcan insignificantes para los que ya han recorrido antes el mismo camino. También, quisiera agradecer a su familia por hacerme sentir como en casa en mi estancia en Chile y al Instituto de diseño y métodos industriales de la Universidad Austral de Chile por su disposición y colaboración.

Agradezco a mi director de tesis Valery Lancheros Suarez por su disposición y atención al proceso, su colaboración en la dirección del trabajo y por concretar todos los detalles para que esta investigación fuera posible.

Agradezco al Ingeniero Jimy Unfried por sus innumerables consejos y por estar siempre presto a corregir y guiar la implementación del método científico en mi formación y en mi trabajo de grado.



## Tabla de contenido

<b>RESUMEN .....</b>	<b>1</b>
<b>ABSTRACT .....</b>	<b>2</b>
<b>1. Capítulo I. Descripción del trabajo de investigación .....</b>	<b>3</b>
1.1. Introducción. ....	3
1.2. Objetivos. ....	4
1.2.1. Objetivo general. ....	4
1.2.2. Objetivos específicos. ....	4
1.3. Estructura de la tesis. ....	5
1.4. Revisión de literatura. ....	6
1.5. Trabajos derivados. ....	10
<b>2. Capítulo II. Selección del método multiescala. ....</b>	<b>11</b>
2.1. Introducción. ....	11
2.2. Selección del método multiescala ....	16
2.3. Conclusiones. ....	17
<b>3. Capítulo III: Implementación de “Atom-to-continuum” .....</b>	<b>18</b>
3.1. Introducción ....	18
3.2. Teoría y modelo .....	18
Simulaciones de dinámica molecular. ....	18
Formulación de cantidades del continuo con ATC .....	22
Esfuerzos locales .....	22
3.3. Resultados. ....	28
3.4. Conclusiones. ....	34
<b>4. Capítulo IV. Comparación de ATC con Hardy. ....</b>	<b>35</b>
4.1. Introducción. ....	35
4.2. Esfuerzos locales estimados con ATC .....	35



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



4.3.	Verificación de los resultados de esfuerzos globales de ATC con Hardy.....	37
4.4.	Discusión .....	38
4.5.	Conclusiones.....	42
<b>5.</b>	<b>Conclusiones Generales y futuros trabajos .....</b>	<b>43</b>
5.1.	Objetivo específico I: .....	43
5.2.	Objetivo específico II: .....	43
5.3.	Objetivo específico III: .....	43
5.4.	Futuros trabajos. ....	44
<b>6.</b>	<b>Bibliografía.....</b>	<b>45</b>



### Lista de tablas

<b>Tabla 1.</b> <i>Leyes físicas gobernantes y ecuaciones suplementarias para cada método. Adaptado de (Díaz, 2020).</i> .....	14
<b>Tabla 2.</b> <i>Evaluación de cuatro métodos multiescala según dos niveles de objetivos.</i> .....	16
<b>Tabla 3.</b> <i>Tamaños de grano y dimensiones de fisuras de los monocristales de Aluminio.</i> .....	18
<b>Tabla 4.</b> <i>Resultados de la implementación del método “Atom-to-Continuum”. Esfuerzo máximo, esfuerzo global y desviación estándar poblacional.</i> .....	32
<b>Tabla 5.</b> <i>Comparación de esfuerzos globales entre ATC y Hardy.</i> .....	38
<b>Tabla 6.</b> <i>Comparación de esfuerzos globales entre ATC y Hardy aplicando la metodología de regiones y campos lejanos en un monocristal de 8.1 nm.</i> .....	39
<b>Tabla 7.</b> <i>Comparación de esfuerzos globales entre ATC y Hardy usando el potencial interatómico WKG.</i> .....	41



### Lista de figuras

**Figura 1.** Comparación de la tenacidad a la fractura de un monocristal de Al con material de microestructura similar. Tomado de (Velilla-Díaz et al., 2021)..... 7

**Figura 2.** Efecto del tamaño de la fisura en el esfuerzo último de un monocristal de Aluminio. Tomado de (Velilla-Díaz & Zambrano, 2021)..... 7

**Figura 3.** Procedimiento para solucionar los 3 problemas propuestos por el método CAAD. Tomado de (Shiari & Miller, 2016)..... 11

**Figura 4.** Procedimiento del método de dominio puente entre MD y FE a través del uso de átomos “fantasmas”. Tomado de (Moseley et al., 2012) ..... 12

**Figura 5.** Modelos de acople atómico/continuo. a) Interfaz nítidas. b) Superposición de dominios. c) Interfaz de transición. Tomado de (Xiong et al., 2012a)..... 13

**Figura 6.** Geometría de acoplamiento de un problema térmico usando AtC. Tomado de (Wagner et al., 2008)..... 14

**Figura 7.** Dimensiones de un monocristal de Aluminio y longitud de la fisura ..... 19

**Figura 8.** Creación de un monocristal a partir de la réplica de celdas unitarios FCC de Aluminio. .... 20

**Figura 9.** Representación de condiciones de frontera periódica en la simulación. .... 20

**Figura 10.** Proceso de deformación uniaxial del cristal de Aluminio bajo tasas de deformación constantes..... 22

**Figura 11.** Procedimiento para implementar el método “Atom-to-continuum”..... 27

**Figura 12.** Campo de esfuerzos locales en monocristales de Aluminio con fisura de borde para diferentes tamaños de grano. .... 29

**Figura 13.** Campo de esfuerzos característico para un paso de deformación en ensayo de tensión en modo I con fisuras. Tomado de (Buehler, 2008)..... 30

**Figura 14.** Distribución de esfuerzos locales para monocristales de Aluminio con diferentes tamaños de grano implementando ATC. .... 31

**Figura 15.** Dependencia de la resistencia última a la tensión con el tamaño de grano para monocristales en azul y policristales en rojo. Adaptado de (Xu & Dávila, 2017b) ..... 32

**Figura 16.** Análisis de convergencia de la resistencia última a la tensión con el número de nodos ..... 33

**Figura 17.** Esquema de volumen representativo para determinar propiedades locales en un punto material XI asignado a un nodo I de la malla. .... 36



**Figura 18.** Comparación de los esfuerzos globales calculados con ATC y la formulación de Hardy para diferentes tamaños de grano..... 37

**Figura 19.** Campos de esfuerzos en un monocristal de Aluminio de 8.1 nm con 2000 elementos implementando regiones internas y externas de deformación de campo lejano. .... 39

**Figura 20.** Campos de esfuerzos en un monocristal de Aluminio de 24 nm con 6000 elementos implementando el potencial interatómico WKG para Aluminio..... 40

**Figura 21.** Comparación de los esfuerzos globales calculados con ATC y la formulación de Hardy para diferentes tamaños de grano usando el potencial interatómico WKG..... 41



## RESUMEN

---

El Aluminio es un material que en el 40% de sus aplicaciones se usa en estado puro. Además, en su escala de longitud nano exhibe una resistencia en el orden de GPa, mientras, en tamaños de grano grueso están en el orden de MPa. En esta investigación se estudió la implementación de un método multiescala que permitió la integración de resultados de simulaciones de la dinámica molecular y el método de elementos finitos para calcular propiedades del continuo. El método multiescala “Atom-to-Continuum” (ATC) fue implementado usando las posiciones y fuerzas interatómicas estimadas a partir de simulaciones de dinámica molecular (MD). El potencial interatómico del átomo embebido EAM del Aluminio puro propuesto por Medelev, fue usado para la simulación del ensayo de tensión en modo I para diferentes tamaños de grano. Los resultados de MD se usaron para implementar ATC a través de una función de localización para estimar esfuerzos en un punto material. Estos valores de esfuerzos locales estimados en los puntos materiales asignados a los nodos de elementos finitos son interpolados a través del mallado. El campo de esfuerzos locales y la resistencia última fueron estimados y se compararon con la formulación de Hardy. Los resultados para diferentes tamaños de grano mostraron un comportamiento similar en las curvas, pero no hubo ajuste entre los dos métodos. Adicionalmente, la resistencia última exhibió dependencia del tamaño de grano en monocristales fisurados.

**Palabras claves:** simulación multiescala, dinámica molecular, elementos finitos, tamaño de grano, resistencia última a la tensión, Atom-to-Continuum.



## ABSTRACT

Forty percent of the applications of Aluminum are made in its pure composition. In addition, fine grain size at the nanoscale shows ultimate tensile strength (UTS) on a scale of GPA. However, coarse grain size shows a UTS on MPa. This investigation studied the implementation of a multiscale method that couples molecular dynamics simulation results with the finite element method to estimate continuum properties. Atom-to-Continuum (ATC) method used positions and interatomic forces estimated from molecular dynamics simulations. The embedded atomic method for Aluminum proposed by Medeleev was implemented in the simulation of a uniaxial tensile test in mode I for different grain sizes. ATC used a localization function that calculates the contribution of forces and positions on the estimation of stress on a material point. Local stress values estimated on material points (nodes) were interpolated with the lineal shape functions of the mesh. The ultimate tensile strength was compared with Hardy's formulation. Results from different grain sizes showed a similar behavior but high relative differences values with Hardy's formulation. In addition, the investigation showed that grain size influences the strength of cracked single-crystal Aluminum.

**Keywords:** Multiscale simulation, Molecular dynamics, finite elements, grain size, Ultimate tensile strength, Atom-to-Continuum.



# Capítulo I. Descripción del trabajo de investigación

---

## 1.1. Introducción.

El Aluminio es uno de los materiales más usados ampliamente en la industria por sus características y propiedades mecánicas. Los tamaños de grano menor a 100 nm que son simulados computacionalmente a través de dinámica molecular exhiben propiedades mecánicas superiores a los de grano grueso. Esta superioridad los hace atractivos para su uso en la industria ya que su resistencia se reporta en el orden de 2.96 a 3.09 GPa para monocristales y bicristales, respectivamente. Este rango varía con la longitud de la fisura de borde, para el caso en mención se la longitud de la fisura es de 5 veces el parámetro de red (Velilla-Díaz et al., 2019a). Por esta razón, es de interés el estudio del comportamiento mecánico del material a escala macroscópica, pero, incluyendo los fenómenos que describe la dinámica molecular y así ampliar el conocimiento existente en materiales fisurados (V. I. Yamakov et al., 2014).

Anteriormente, se han desarrollado varios métodos multiescala que tienen limitaciones por su baja temperatura de equilibrio del sistema, el número de átomos usado para las simulaciones o la dificultad de acoplar los dominios atómico y continuo (Shilkrot et al., 2004). Dadas estas condiciones, esta investigación permite ampliar el conocimiento teórico sobre las simulaciones multiescala en el área académica y evaluar su uso para estimar el comportamiento mecánico del Aluminio.

Los resultados obtenidos en la escala nano como la zona de elasticidad extendida (Xu & Dávila, 2017a), la influencia de la frontera de grano en el comportamiento mecánico de los materiales (Velilla-Díaz et al., 2019a), el corto alcance que pueden tener las teorías que gobiernan la mecánica del medio continuo para explicar la relación Hall-Petch (Xu & Dávila, 2018) y las limitaciones de ensayos experimentales a escala nanométrica en materiales fisurados encuentran en la simulación multiescala una oportunidad para entender la naturaleza de fenómenos no lineales que surgen en los materiales fisurados sometidos a una carga externa. A través de la implementación de estos métodos multiescala se pueden vincular defectos como vacíos, dislocaciones, fisuras y el rompimiento de enlaces que tienen origen en la nano escala (Ding et al., 2020). De esta forma, es posible entender mejor el comportamiento mecánico de los materiales, en particular el aluminio, de gran interés en industrias con tecnología de punta y en la revolución 4.0. En este orden de ideas nace el planteamiento del problema a estudiar: ¿Es posible estimar el comportamiento mecánico de un Aluminio fisurado haciendo una simulación multiescala que acople los resultados de MD en un monocristal de aluminio con FEM?



## **1.2. Objetivos.**

Con el fin de lograr el desarrollo de la presente tesis, se muestra a continuación el objetivo general y los objetivos específicos que lo permiten.

### **1.2.1. Objetivo general.**

Implementar un método multiescala en una simulación computacional que permita estimar el comportamiento mecánico de un aluminio fisurado acoplado los resultados de un monocristal en MD con FEM aumentando el tamaño del material.

### **1.2.2. Objetivos específicos.**

#### **Objetivo específico I.**

Determinar el método multiescala apropiado para acoplar los resultados de simulaciones de MD con FEM para un material aluminio.

#### **Objetivo específico II.**

Implementar el método multiescala seleccionado para estimar el comportamiento mecánico del aluminio acoplado MD con FEM.

#### **Objetivo específico III.**

Comparar el método multiescala propuesto con el método de Hardy para estimar propiedades locales en MD.



### 1.3. Estructura de la tesis.

El trabajo actual organizado con la estructura que se detalla a continuación:

En el **Capítulo II** se hace una revisión de la literatura de los diferentes métodos multiescala que permiten la integración de la dinámica molecular y las teóricas de mecánica del medio continuo, en este caso la aplicación del método de elementos finitos. Se presenta el procedimiento para seleccionar el método a utilizar en la simulación y los criterios usados que limitan y son de interés en la investigación.

En el **Capítulo III** se explica la teoría de dinámica molecular para el entendimiento de los modelos computacionales de materiales nanoestructurados y las previas simulaciones de tensión uniaxial bajo pasos de desplazamientos controlados que se usaran como punto de partida para la investigación, se define el potencial interatómico que modela el Aluminio puro, se define el método multiescala a implementar para esta investigación y las ecuaciones matemáticas que gobiernan el cálculo del tensor de esfuerzos locales de Cauchy a partir de los resultados de la dinámica molecular, se establecen las condiciones de frontera del modelo, se definen las geometrías y las cantidades atómicas que se van a usar para la simulación.

En el **capítulo IV** se presenta la evaluación del método implementado a través de un estadístico descriptivo y un comparativo cualitativo del método multiescala y la formulación de Hardy (Hardy, 1982). Se introducen conceptos de la teoría del medio continuo para ensayos en modo I y se realizan comparaciones con los resultados obtenidos.

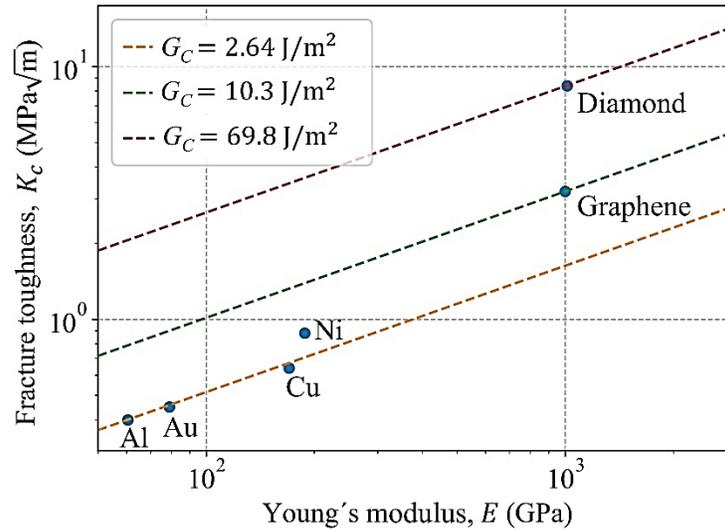


## 1.4. Revisión de literatura.

La creciente e influyente investigación de los nanomateriales, sus fenómenos físicos y sus llamativas propiedades han catapultado a la ciencia a querer aplicar los resultados de estos hallazgos a otras escalas de longitud y tiempo. Las investigaciones y el avance en la computación han posibilitado la observación de fenómenos y la creación de soluciones en esta pequeña escala que son verdaderamente novedosas. Entre estos hallazgos y desarrollos están: nanotubos de carbono, nanoflakes como semiconductores, nanopartículas como celdas de combustible, nano robots, soluciones aeroespaciales y materiales traslucidos a escala nanométrica que naturalmente son opacos entre otros. En la creciente vertiente de la nanociencia, numerosos científicos están activamente estudiando sus propiedades eléctricas, los nanocompuestos poliméricos y los materiales biomiméticos. Sin embargo, el centro de interés está en la nano mecánica y la simulación de su microestructura para predecir las propiedades mecánicas de los materiales.

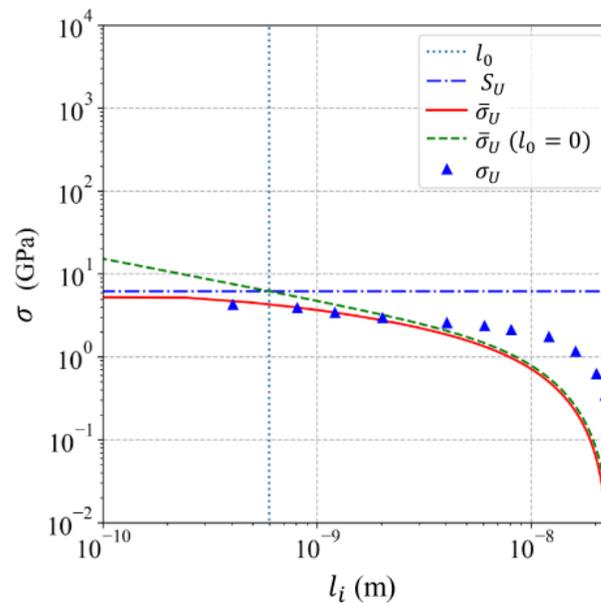
Entre las primeras investigaciones en los 80s de materiales nanoestructurados con fisuras se encuentra (DeCelis et al., 1983), quienes investigaron la propagación de fisuras en alfa-hierro y cobre usando los potenciales de Johnson y Morse encontrando que el alfa-hierro es naturalmente frágil y falla por sus planos de deslizamiento, mientras que, el cobre demuestra un comportamiento dúctil. Mas tarde, los científicos (Kumar et al., 2003) estudiaron las propiedades mecánicas de nano cristales de metales y sus aleaciones usando dinámica molecular para estudiar deformaciones, evolución del daño, fractura, fatiga, nucleación y defectos en respuesta a una carga.(J. A. Zimmerman et al., 2004) calcularon cantidades del continuo, en este caso esfuerzos, usando la formulación de Hardy. Estos resultados locales promediados los compararon con los resultados globales obtenidos con la implementación del teorema del Virial y encontraron consistencia entre estos valores. Además, estudiaron el comportamiento de la expresión de esfuerzos de Hardy cerca de las superficies libres.

En una línea más específica de los metales, (Chandra et al., 2016) estudiaron a través del método del átomo embebido (EAM) el Aluminio de estructura cristalina FCC bajo condiciones de carga I y el comportamiento de la punta de la fisura con defectos y sin defectos en la matriz previamente fisurada encontrando que estas vacancias endurecen el material debido a la disminución de la velocidad de propagación de la grieta. (Xu & Dávila, 2017a) por su parte, usando dinámica molecular investigaron cómo las propiedades mecánicas de un aluminio puro dependen del tamaño de grano ( $d < 100 \text{ nm}$ ) encontrando que el refinamiento del tamaño de grano por debajo del valor indicado causa un incremento del esfuerzo a la fluencia y cómo la relación Hall-Petch no se cumple para tamaños de grano  $10 < d < 20 \text{ nm}$ . (Velilla-Díaz et al., 2019a) estudiaron el efecto que tiene la frontera de grano en la tenacidad a la fractura para un Aluminio teniendo como resultado una tenacidad a la fractura de aproximadamente 5 veces mayor en el bicristal comparado con un monocristal y esto debido al rol de la frontera de grano en el comportamiento mecánico del material. Adicionalmente, (Velilla-Díaz et al., 2021) estudiaron la tenacidad a la fractura de un monocristal de aluminio por cuatro métodos diferentes, uno de ellos calculando la tasa de liberación de energía  $G_c$  para calcular  $K_c$  demostrando que  $G_c$  tiende a ser constante para materiales de la misma microestructura, este comportamiento se puede observar en la **Figura 1** dónde el aluminio es comparado con otros metales de estructura FCC.



**Figura 1.** Comparación de la tenacidad a la fractura de un monocristal de Al con material de microestructura similar. Tomado de (Velilla-Díaz et al., 2021)

(Velilla-Díaz & Zambrano, 2021) estudiaron el efecto del tamaño de la fisura en el comportamiento mecánico de un monocristal de aluminio, encontrando que el tamaño de la fisura afecta el esfuerzo último de fractura del material. En la **Figura 2** se puede ver como para valores menores a un tamaño crítico de longitud de fisura  $l_0$  el esfuerzo último está sobre un valor fijo llamado  $S_U$ . Sin embargo, para fisuras con valores mayor a  $l_0$  el esfuerzo último ya no es constante en un valor fijo, por el contrario, empieza a disminuir y es gobernado por las teorías de la mecánica de la fractura  $\sigma_U$ .



**Figura 2.** Efecto del tamaño de la fisura en el esfuerzo último de un monocristal de Aluminio. Tomado de (Velilla-Díaz & Zambrano, 2021)



Estos hallazgos de la nano-mecánica son destacados por su importancia de cara a obtener una comprensión más exacta del comportamiento mecánico de los materiales en una escala macroscópica. De este interés, desciende el desafío de avanzar en los modelos y simulaciones multiescala que permiten relacionar los resultados de una escala menor a una mayor o viceversa ya sea en tamaño o en el tiempo. Para el caso del diseño de componentes y sistemas a gran escala, incluir dentro de los cálculos de diseño los fenómenos y parámetros microestructurales que se dan desde la escala nano, permitiría optimizar el diseño mecánico de productos. Esto debido a los comportamientos mecánicos que se dan en el tamaño atómico y que no son tenidos en cuenta en la escala del continuo. Algunos de los retos de vincular estos fenómenos como la presencia de dislocaciones, los planos rotados o la propagación de una grieta a través de las fronteras de grano son el grado de exactitud y precisión del modelo usado para unir las diversas escalas, la cantidad de datos e información que deben ser evaluados para ignorar o tener en cuenta sus efectos dentro del continuo y la incertidumbre asociada al modelo (Leszczynski & Shukla, 2010).

En la revisión de los modelos más estudiados, ver (Elliott, 2011) se define la simulación multiescala como la aplicación de una técnica dónde interactúan dos o más escalas de longitud y tiempo diferentes, que en su mayoría son distintas en las teorías que los gobiernan. Adicionalmente, se discriminan dos métodos ampliamente usados para las simulaciones multiescala y son: el método jerárquico y el método concurrente.

En (Budarapu & Rabczuk, 2017) los autores definen los dos métodos, el **método jerárquico** implica pasar por cada una de las escalas desde la más pequeña a una mayor, pero no viceversa. Es necesaria una técnica de homogeneización o de análisis estadístico para establecer relaciones de causa – efecto de la escala inferior sobre la escala superior. Registran investigaciones dónde el método ha funcionado bien para flujos multifase en medios porosos, nanocompuestos poliméricos, caracterización del comportamiento de un material de la zona afectada térmicamente en conexiones soldadas e incluso la fractura de sólidos cristalinos, aunque resulte complejo y limitado homogeneizar las teorías. Por otro lado, el **método concurrente** rompe con esta limitación de la homogeneización usando un puente de naturaleza numérica y computacional entre los dos dominios y que permite el paso de una escala menor a una mayor o viceversa. La flexibilidad de este método ha permitido su aplicación en investigaciones de la teoría de la mecánica de la fractura. Sin embargo, su dificultad radica en la optimización del algoritmo de integración de las dos escalas a interactuar.

Los autores de (Manolis et al., 2021) concluyen que el método concurrente trabaja mejor en problemas dinámicos. Este método se podría usar en simulaciones continuo-continuo, atomístico-atomístico o atomístico-continuo. Desde el punto de vista del estudio del comportamiento de los materiales, este último enfoque discreto-continuo es el que permitiría vincular los fenómenos presentes en la escala nanométrica en el medio continuo.

Múltiples investigadores han estudiado usando los modelos multiescala el comportamiento de los materiales en escala macroscópica partiendo desde las respuestas en la nano escala. En (Kohlhoff et al., 1991) los autores estudiaron a través de un método atomístico-continuo, la propagación de una grieta en materiales con estructura cristalina BCC utilizando el potencial del hierro y el tungsteno y considerando los planos de deslizamiento en la fractura. Por su parte, en (Weinan & Huang, 2002) proponen un método atomístico-continuo para estudiar la dinámica de



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



la fractura en materiales cristalinos. Su enfoque busca que la dinámica molecular simule la zona de los defectos dónde se encuentra la grieta y la mecánica del medio continuo para lo más alejado de esta zona. El método minimiza la reflexión de fonones en la zona de cohesión de los dominios atómico-continuo. Sin embargo, su mayor limitación es que sólo trabaja bien a bajas temperaturas o en el cero absoluto. En (V. Yamakov et al., 2008) estudiaron a través de un método de acoplamiento estadístico integrado (ESCM) la propagación de una fisura en un aluminio con iniciación de la fisura en el medio continuo y propagación en la escala atómica. El método usado no realiza un enlace directo entre los átomos del modelo de dinámica molecular y los nodos del método de elementos finitos en la región intermedia, sino que hace un promedio estadístico que asocia los desplazamientos generados en los volúmenes atómicos con los nodos de la mecánica del medio continuo. (V. I. Yamakov et al., 2014) estudiaron el hermanamiento de dislocaciones y la dislocación completa en la punta de fisura de un aluminio usando el método concurrente (ESCM). Incluyeron dentro de la investigación variantes como la orientación y temperaturas cristalográficas. Finalmente, usaron el método del medio continuo de Peierls para interpretar los resultados ya que usa propiedades de temperatura finita proveniente de la dinámica molecular. Sin embargo, existen ciertos casos en los que el modelo no predice correctamente los resultados que el método multiescala logra. En (Shiari & Miller, 2016) investigaron la propagación de una grieta con coalescencia de dislocaciones y nano vacíos en un Níquel (fractura frágil) y un Aluminio (fractura dúctil) usando el método acoplado de dislocaciones atómicas y discretas (CADD). El método usado adapta dislocaciones discretas en el medio continuo y una de las limitaciones del estudio es el tamaño de la zona atómica con sólo 14.000 átomos. En (Ghosh & Zhang, 2017) los autores investigaron la fractura en un monocristal de Níquel con grieta en el tamaño nanométrico a temperatura finita y una región alrededor de esta dominada por un modelo constitutivo de elasticidad cristalina. Usaron un método concurrente que vincula el dominio atómico-continuo. En este es alcanzado la compatibilidad geométrica y el equilibrio de fuerzas en la región dónde se interceptan los dos dominios. Validan los resultados del método concurrente usando un modelo completo de elementos finitos. Por último, en (Chakraborty & Ghosh, 2021) estudiaron la propagación de una grieta en un monocristal de Níquel en la región atómica escalándolo al medio continuo. Desarrollaron un método para incluir las dislocaciones discretas de la nano escala en el dominio macroscópico y la propagación de las densidades de dislocación lo lograron usando el método de reproducción de partículas de Kernel (RKPM) y el método de colocación. En esta investigación, se busca desarrollar una simulación multiescala aplicando un método multiescala concurrente para un aluminio, que, aunque ha sido estudiado antes se ha hecho con el método CADD y con limitaciones en el modelo atómico por su tamaño.



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



## 1.5. Trabajos derivados

### PONENCIAS EN CONGRESOS INTERNACIONALES

#### XV Congreso Iberoamericano de Ingeniería Mecánica

Título de la ponencia: “Efecto de tamaño de grano en el comportamiento mecánico de un nano cristal de Aluminio”

Lugar: Madrid, España. Año:2022

#### XX Jornada de Mecánica Computacional

Título de la ponencia: “Evaluación del campo de esfuerzos en un monocristal de aluminio con fisura en el borde implementando ATC”

Lugar: Valdivia, Chile. Año: 2022

### ARTÍCULO SOMETIDO EN JOURNAL WoS (EN PROCESO)

Nombre del Journal: Nanomaterials

Título de la publicación: Local stress field estimation in edge crack nanocrystal using Atom-to-Continuum as a coarse-graining approach

ISSN: 2079-4991

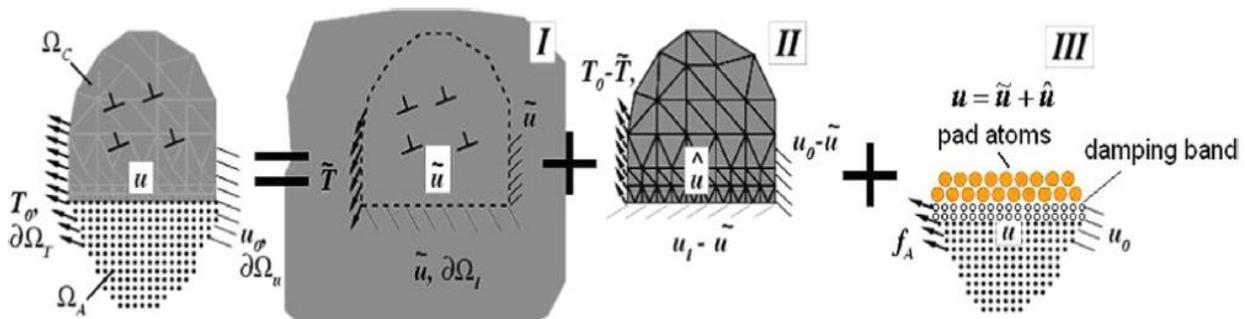
## Capítulo II. Selección del método multiescala

### 2.1. Introducción.

Los nanomateriales son uno de los logros científicos de finales del siglo XX y principios del siglo XXI que rápidamente mostraron su gran potencial en el desarrollo de ingeniería aplicada en campos tales como: la tecnología de microfabricación, las estructuras aeroespaciales, las celdas de combustible, la microelectrónica, los motores de propulsión, la bioingeniería, entre otros. Sin embargo, la nanomecánica había recibido menos atención por parte de la comunidad científica y hoy representa un reto para desarrollar modelos matemáticos que logren predecir el comportamiento global y local de los materiales y de los costosos ensayos experimentales (Manolis et al., 2021). A pesar de que la dinámica molecular, ha permitido estudiar los materiales en su estructura fundamental y describir defectos como las fisuras y dislocaciones que influyen en gran medida su comportamiento, sigue siendo un reto el cálculo numérico de sistemas de gran escala con millones de grados de libertad. Debido a la demanda de recurso computacional, nacen los métodos multiescala que permiten integrar los resultados de la dinámica molecular en el cálculo de propiedades del medio continuo (Budarapu & Rabczuk, 2017).

#### Dinámica acoplada de dislocación atómica y discreta (CADD)

Este método concurrente es formulado en la investigación de (Shilkrot et al., 2004) dónde estudian la interconexión de ciertos fenómenos que se describen en la nano escala como son la nucleación de dislocaciones, propagación, la formación de grietas, crecimiento y su adaptación a un modelo del medio continuo como dislocación discreta. (Shilkrot et al., 2004) propone que las dislocaciones se conviertan en defectos elásticos y se tratan utilizando una estructura de dislocación discreta. Para esto, hacen la superposición de 3 problemas como se ilustra en la **Figura 3**.



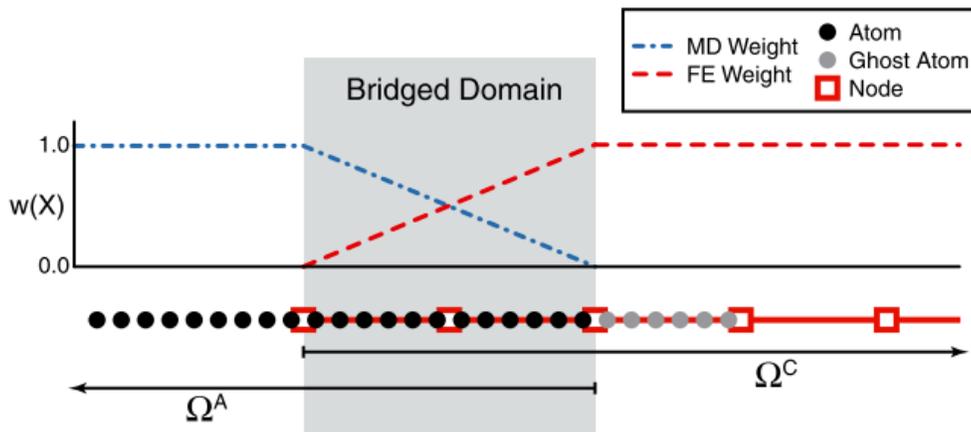
**Figura 3.** Procedimiento para solucionar los 3 problemas propuestos por el método CAAD. Tomado de (Shiari & Miller, 2016)

El método soluciona el problema de valor de frontera dónde un cuerpo  $\Omega$  soporta una tracción  $T = T_0$  en  $\partial\Omega_T$  y desplazamientos  $u = u_0$  en  $\partial\Omega_u$ . Sugiere dividir el cuerpo en regiones

separadas, uno de dominio atómico  $\Omega_A$ , otro continuo  $\Omega_C$  y lo que comprende a una región de interfaz  $\partial\Omega_I$  definida por una línea de átomos. Los dos primeros problemas ilustrados en la **Figura 3** como I y II descienden del dominio del medio continuo y son solucionados con la metodología de dislocación discreta planteada por (Van der Giessen & Needleman, 1995). El primer problema del continuo (3I) proviene de la dislocación discreta y radica en defectos de la línea de dislocación embebidos en un medio elástico infinito. El otro problema del continuo (3II) corresponde a un problema elástico lineal que desciende de la corrección requerida a los elementos finitos luego de aplicar las condiciones de frontera y cargas verdaderas debidas a la zona de acoplamiento y las condiciones externas. Por último, el problema (3III) comprende la definición de una zona de detección y amortiguación que pasa las dislocaciones del dominio atómico al continuo para evitar movimientos falsos. En esta interfaz se encuentran unos átomos, llamados “almohadillas”, acoplados al campo de desplazamiento del medio continuo y los nodos de elementos finitos en la interfaz se acoplan a estos átomos.

### Método de elementos finitos extendido (XFEM)

El método fue propuesto por los investigadores (Moseley et al., 2012) con la intención de modelar la propagación de defectos en los materiales. Está basado en el método de “dominio puente” (BDM) tal como se puede apreciar en la **Figura 4**.



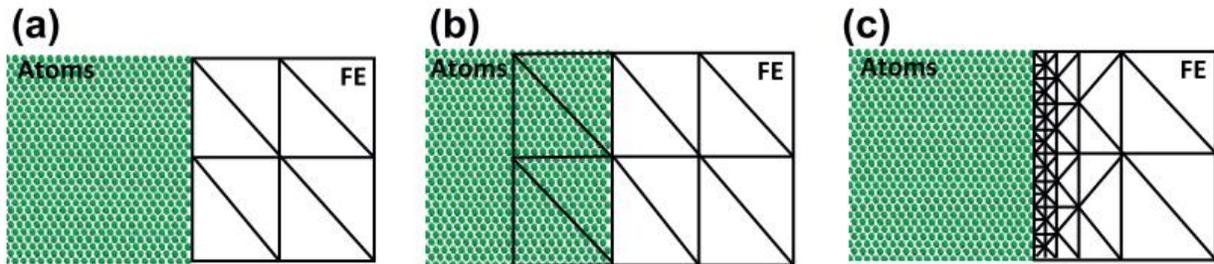
**Figura 4.** Procedimiento del método de dominio puente entre MD y FE a través del uso de átomos “fantasmas”. Tomado de (Moseley et al., 2012)

El método es muy similar a CADD puesto que existe una superposición de dominios donde un componente adaptativo como son fracciones de transición estratégicos de dominio entre el continuo  $\Omega_C$  y el atómico  $\Omega_A$  suceden de tal forma que el dominio atómico coincide continuamente con un defecto a medida que se propaga. Si la transición ocurre desde  $\Omega_C$  a  $\Omega_A$  se le denomina “grano fino” y al inverso como “grano grueso”. En resumen, la zona que llaman “dominio puente” describe la información de los defectos provenientes de la escala atómica y que se vuelven de

grano grueso cuando son regulares o se refinan cuando se está propagando tal como lo propone (Moseley et al., 2012) en el capítulo 3 como adaptabilidad. Además, Belytschko y compañía proponen que la parte de dominio meramente continua sea regida por la regla de “Cauchy Born” y la de sólo atómica por MD.

### Método concurrente Atomístico-continuo (CAC)

El método concurrente atomístico-continuo fue propuesto por (Xiong et al., 2012a) con la intención de simular la dinámica de dislocaciones a través de una metodología que combina las leyes de equilibrio del campo continuo basada en la información atomística con un método de elementos finito modificado. Lo novedoso del método es que solamente se requiere del potencial interatómico para describir los fenómenos del dominio atomístico y no existe un algoritmo de cohesión que sea requerido para la nucleación y propagación de dislocaciones entre dominios.



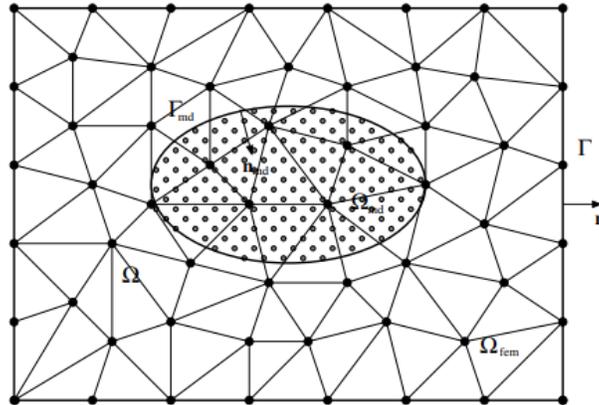
**Figura 5.** Modelos de acople atomístico/continuo. a) Interfaz nítida. b) Superposición de dominios. c) Interfaz de transición. Tomado de (Xiong et al., 2012a).

En método CAC el dominio atomístico, en verde, puede interactuar directamente con el de grano grueso (FE) como se muestra en la **Figura 5a**. Otros métodos requieren de una región de superposición o transición como se muestra en la **Figura 5a a 5c**. La facilidad del método CAC deriva de que tanto el dominio atomístico como el continuo están descritos por la misma ley y se valen de tan sólo el campo de fuerza no local como relación constitutiva para lograrlo.

### Método Átomo a continuo (ATC)

El método Átomo a continuo es propuesto por (Jones, Templeton, & Zimmerman, 2016) y propone un acoplamiento desde el marco matemático de los dominios atomístico y continuo, mezclándolos en un subdominio con las restricciones apropiadas. Proponen que un acoplamiento consta básicamente de 4 pasos: *i)* aumento de escala consistente de los datos atómicos. *ii)* Balances gobernantes multiescala que conecten dominio atómico con continuo. *iii)* modelos constitutivos continuos consistentes. *iv)* esquemas de control atomístico para efectuar la influencia del continuo en la representación atomística.

Lo novedoso de este método es su capacidad de tratar todas las posibilidades de transporte térmico a nano escala desde su inicio **Figura 6** y proveer esos balances multiescala consistentes.



**Figura 6.** Geometría de acoplamiento de un problema térmico usando AtC. Tomado de (Wagner et al., 2008)

A continuación, en la **Tabla 1** se resumen las leyes que gobiernan el movimiento del sistema en los diferentes métodos y las ecuaciones suplementarias requeridas para establecer las zonas de interfaz o cohesión y el cálculo de las fuerzas.

**Tabla 1.** Leyes físicas gobernantes y ecuaciones suplementarias para cada método. Adaptado de (Diaz, 2020)

Método	Leyes gobernantes	Ecuaciones suplementarias
<b>CADD</b>	<p>Conservación de momento:</p> <p>Atómico: <math>m \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}}</math>.</p> <p>Continuo: <math>\rho \frac{d^2 \hat{\mathbf{u}}}{dt^2} + \nabla_x \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{b} + \oint \boldsymbol{\tau} \cdot d\mathbf{S}</math>.</p> <p>Dónde <math>\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{(k)}</math> se refiere a la K-esima contribución de esfuerzo de la dislocación. Es calculado a través de un modelo analítico que puede ser consultado en (Van der Giessen &amp; Needleman, 1995)</p> $\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}} + \tilde{\mathbf{u}},$ $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \sum_k \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^k.$	<p>✓ Detección de dislocaciones y amortiguación en la interfaz.</p> <p>✓ Fuerzas de Peach-Koehler:</p> $\mathbf{f}^{(k)} = \mathbf{n}^{(k)T} \left( \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \sum_{l \neq k} \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^{(l)} \right) \mathbf{b}^{(k)},$ <p>dónde (k) se refiere a la K-esima dislocación y <math>\mathbf{f}^{(k)}</math> es la fuerza a través del plano de deslizamiento.</p>
<b>XFEM</b>	<p>Mecánica lagrangiana</p> <p>Modelo atómico y continuo:</p> $L_A = \sum_i [w(X_i) m_i v_i^2 - \bar{w}(X_i) U_i],$	<p>✓ Fuerzas de restricción</p> $A_{ji} \lambda_i = \frac{-2}{\Delta t} g_j,$

$$L_B = \sum_{i \in S^B} \lambda_i [u(X_i) - u_i],$$

$$A_{ji} = \sum_{l \in B} \frac{\Phi_l(X_j) \Phi_l(X_i)}{\bar{m}_i} + \frac{\delta_{ji}}{\bar{m}_\alpha},$$

$$L_c = \int_{V_0^c} \ell dV_0^c,$$

$$g_j = v_i^h - \Phi_l(X_i) \dot{U}_l^h,$$

dónde  $h$  está definido como la mitad del paso de tiempo.

$$\ell = \left[ (1 - w(X)) \left( \frac{\rho_0(X)}{2} \dot{u}^2(X) - W^c C(X) \right) \right],$$

$$L = L_A + L_B + L_c,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \dot{U}_i} - \frac{\partial L}{\partial U_i} = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial v_i} - \frac{\partial L}{\partial u_i} = 0.$$

**CAC** Leyes de conservación en ambas escalas atómica y continua: Ninguna

$$\frac{d\rho^\alpha}{dt} + \rho^\alpha (\nabla_x \cdot \mathbf{v} + \nabla_{y^\alpha} \cdot \Delta \mathbf{v}^\alpha) = 0,$$

$$\rho^\alpha \frac{d}{dt} (\mathbf{v} + \Delta \mathbf{v}^\alpha) = \nabla_x \cdot \boldsymbol{\tau}^\alpha + \nabla_{y^\alpha} \cdot \boldsymbol{\tau}^\alpha + f_{ext}^\alpha,$$

$$\rho^\alpha \frac{de^\alpha}{dt} = \nabla_x \cdot \mathbf{q}^\alpha + \nabla_{y^\alpha} \cdot \mathbf{J}^\alpha + \mathbf{t}^\alpha$$

$$: \nabla_x (\mathbf{v} + \Delta \mathbf{v}^\alpha) + \boldsymbol{\tau}^\alpha : \nabla_{y^\alpha} (\mathbf{v} + \Delta \mathbf{v}^\alpha).$$

**ATC** Leyes de conservación Atómico: ✓ Proyección de la velocidad.  
✓ Cálculo de constantes de amortiguación.

$$\rho_0(\mathbf{X}) = \sum_{\alpha=1}^N m^\alpha \psi(\mathbf{X}^\alpha - \mathbf{X}),$$

$$\mathbf{P}_0(\mathbf{X}) = \sum_{\alpha=1}^N m^\alpha \mathbf{v}^\alpha \psi(\mathbf{X}^\alpha - \mathbf{X}),$$

$$\rho_0(\mathbf{X}) e(\mathbf{X}, t) = \sum_{\alpha=1}^N \left\{ \frac{1}{2} m^\alpha (\mathbf{v}^\alpha)^2 + \phi^\alpha \right\} \psi(\mathbf{X}^\alpha - \mathbf{X}).$$

Continuo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0,$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} = \nabla_x \cdot (\boldsymbol{\sigma} - \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) + \rho \mathbf{b},$$

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} = \nabla_x \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v} - \rho e \mathbf{v} - \mathbf{q}) + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} + \rho h.$$

## 2.2. Selección del método multiescala

A continuación, se presenta en la **Tabla 2** la matriz multicriterio por pesos propuesta en (Velilla Díaz & Palencia Díaz, 2015) y que se usa en esta investigación para la selección de uno de los métodos según unos objetivos de nivel 1 y 2 que establecen los límites y el alcance de la investigación. Para esto se definieron unos pesos según cada objetivo.

**Tabla 2.** Evaluación de cuatro métodos multiescala según dos niveles de objetivos.

<b>Matriz multicriterio con escala de valoración 1-5, siendo 5 la mejor puntuación</b>						
Objetivo Nivel 1	Objetivo Nivel 2	Peso del Objetivo	CAC	AtC	CAAD	XFEM
<b>Recurso computacional</b>	Optimización del método	20%	4	4	4	4
	Codificación del método	35%	3	5	1	1
<b>Afinidad con fisuras y dinámica molecular</b>	Ecuaciones rectoras de cada método y suplementarias	25%	5	4	4	4
	Acoplamiento de dominios	20%	5	4	4	4
<b>Total</b>		100%	4,1	<b>4,35</b>	2,95	2,95

### Recurso computacional:

**Optimización del método:** en este objetivo se evaluó los valores de entrada requeridos para implementar el cálculo de las cantidades del continuo basados en los resultados de dinámica molecular.

**Codificación del método:** en este objetivo se evaluó si el método se encuentra codificado en algún lenguaje de programación o en programas de uso libre en Lammmps o GitHub.

### Afinidad con fisuras

**Ecuaciones rectoras de cada método y suplementarias:** en este objetivo se evaluó la similitud de las ecuaciones rectoras en cada dominio y su similitud con la formulación de Hardy.



**Acoplamiento de dominios:** en este objetivo se evaluó la necesidad de zonas cohesivas o de interfaz con la que se acoplen los dos dominios sin la necesidad de ecuaciones suplementarias o leyes constitutivas y los hallazgos de la literatura dónde se encuentran problemas de transferencia de información de un dominio a otro en problemas con fisura o defectos.

### 2.3. Conclusiones.

- El método “Atom-to-continuum” supera en un 5% de calificación al método “Concurrent atom-to-continuum” siendo la codificación un factor determinante en la evaluación.
- Las ecuaciones rectoras en “Concurrent atom-to-continuum” obtuvieron una calificación mayor debido a que es posible usar las mismas ecuaciones para ambos dominios en su formulación lo que genera una ventaja numérica en el cálculo.
- Los métodos XFEM y CADD obtuvieron una puntuación del 60% debido a que no se encuentran codificados en ningún lenguaje de programación y el acoplamiento de los dominios requiere de una zona cohesiva o de interfaz con ecuaciones suplementarias para integrar las dos escalas. XFEM por su parte requiere un refinamiento de malla hasta la escala nano para acoplar con el sistema de átomos y CADD es un método pensado para el estudio de dislocaciones.

# Capítulo III: Implementación de “Atom-to-continuum”.

## 3.1. Introducción

El método “Atom-to-continuum” provee una herramienta numérica que permite la integración de la dinámica molecular y el método de elementos finitos. Estos métodos MD y FEM son muy poderosos en la nano escala y la macro escala, respectivamente. “Atom-to-continuum” busca usar la dinámica molecular para capturar fenómenos, singularidades y mecanismos de falla a nivel atómico que permitan estudiar y predecir el comportamiento del material desde su estructura cristalina y la energía de sus enlaces atómicos. No obstante, los modelos que usan dinámica molecular tienen limitaciones para simular dispositivos de escala, incluso microscópica, debido a las ineficiencias computacionales. Estas ineficiencias son producto de los miles o millones de grados de libertad que puede tener el sistema, la naturaleza no conservativa de algunos algoritmos y los errores asociados al cálculo numérico. Esto hace que del método de elementos finitos una herramienta eficiente para definir cantidades como los desplazamientos y la resistencia del material a medida que aumenta la escala (J. A. Zimmerman et al., 2004; Jonathan. Zimmerman et al., 2016).

El método “Atom-to-continuum” es una adaptación a la configuración lagrangiana o de referencia de la formulación de Hardy que fue propuesta inicialmente en la configuración euleriana. El enfoque de grano grueso o “coarse-graininig” como se conoce en la literatura inglesa, usa cantidades atómicas y se establece un punto material dentro de un volumen fijo. En este volumen con un radio definido existen  $N$  átomos sobre los cuales se calcula la fracción de enlace que contribuyen a estimar campos de esfuerzos en el continuo. Los valores nodales se interpolan con las funciones de forma del mallado que representa el dominio de FE (J. A. Zimmerman et al., 2010).

## 3.2. Teoría y modelo

### Simulaciones de dinámica molecular

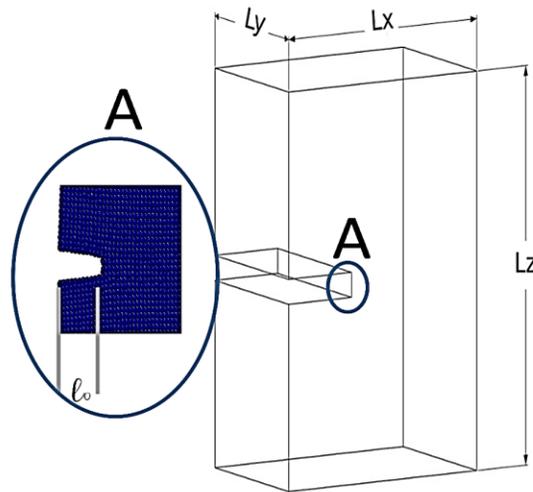
En las simulaciones de dinámica molecular se usó el potencial interatómico del átomo embebido (EAM) propuesto por Mendeleev (Mendeleev et al., 2008) para estudiar metales FCC con defectos, en este caso, el Aluminio. Se estudiaron monocristales con las siguientes dimensiones:

**Tabla 3.** Tamaños de grano y dimensiones de fisuras de los monocristales de Aluminio.

Tamaño de grano [nm]	Dimensiones del cristal [a] $L_x \times L_y \times L_z$	Dimensión de la fisura [a]	N. de átomos del sistema
----------------------	--	----------------------------	--------------------------

<b>3.24</b>	$8a \times 8a \times 8a$	$2.5a$	1856
<b>4.86</b>	$12a \times 10a \times 12a$	$4a$	5400
<b>6.08</b>	$15a \times 10a \times 15a$	$5a$	8560
<b>8.10</b>	$20a \times 10a \times 20a$	$7a$	15780
<b>16.20</b>	$30a \times 20a \times 40a$	$10a$	94320
<b>24.30</b>	$60a \times 20a \times 40a$	$20a$	188720

dónde  $a$  es el parámetro de red del aluminio que corresponde a  $a = 4.05\text{Å}$ . Las longitudes de la fisura mantuvieron una relación de aproximadamente  $\frac{1}{3}$  de  $L_x$ . En la **Figura 7** se puede observar el dimensionamiento de un monocristal y en la **Figura 8** se muestra cómo se crea un tamaño de grano realizando la réplica de una celda unitaria FCC de Aluminio que contiene 4 átomos. La fisura se crea haciendo la sustracción de un volumen de átomos con un ancho que supere el radio de corte del potencial, es decir dos veces el parámetro de red  $a$ .

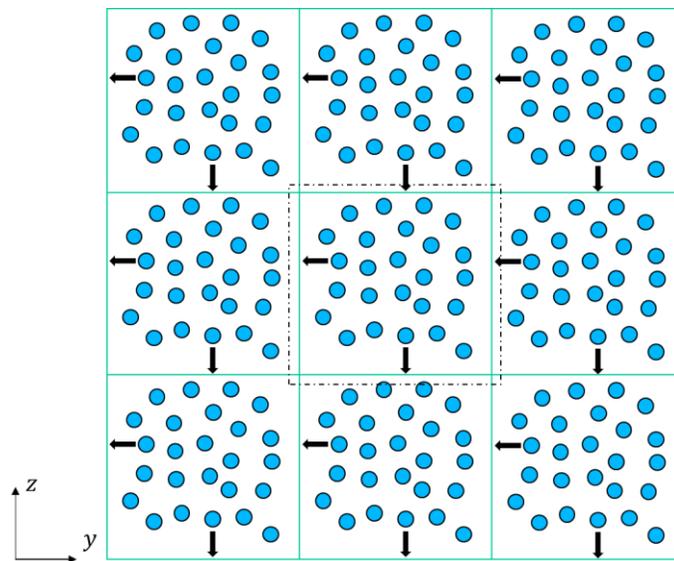


**Figura 7.** Dimensiones de un monocristal de Aluminio y longitud de la fisura



**Figura 8.** Creación de un monocristal a partir de la réplica de celdas unitarios FCC de Aluminio.

Para la simulación se implementaron condiciones de superficie libre en la dirección  $\vec{x}$ , mientras en las direcciones  $\vec{y}$  y  $\vec{z}$  se implementaron condiciones de frontera periódica. El cristal está construido con réplicas de la celda FCC en las direcciones  $\langle 100 \rangle \langle 010 \rangle \langle 001 \rangle$ . En la **Figura 9** se muestra el concepto de frontera periódica ampliamente utilizado para el cálculo de propiedades de volumen “Bulk” simulando longitudes infinitas en las direcciones especificadas usando réplicas de la caja de simulación original (línea punteada). Adicionalmente, las fronteras periódicas son usadas para evitar el efecto de borde que no son deseables e influyen en los resultados tal como lo demuestran en (J. A. Zimmerman et al., 2004).



**Figura 9.** Representación de condiciones de frontera periódica en la simulación.

Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica

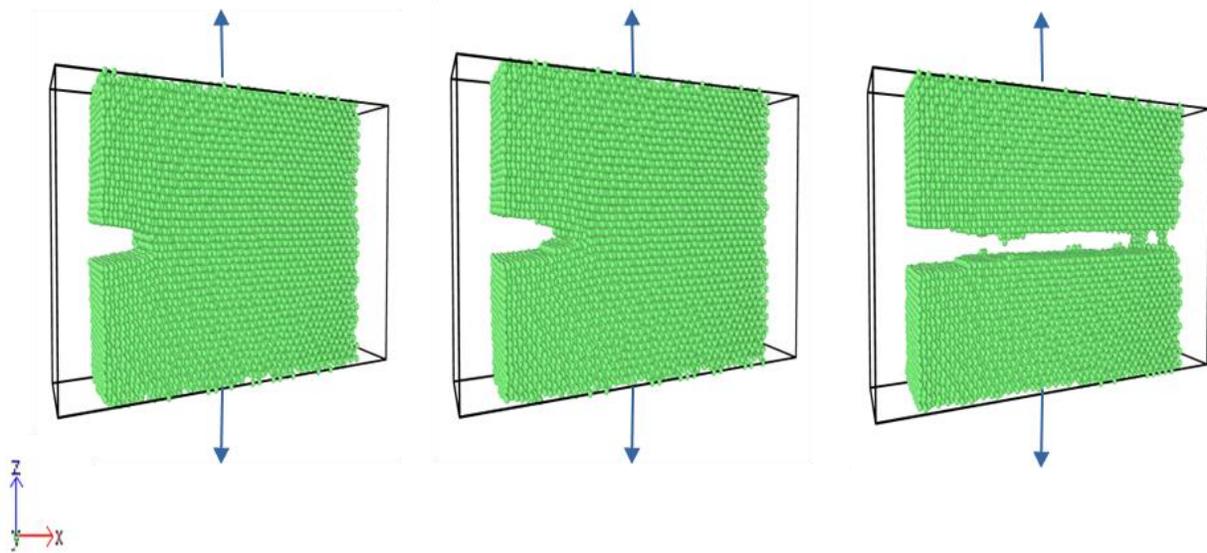
En las condiciones de frontera periódica los átomos dentro de la caja de simulación original están interactuando entre ellos, pero también tienen influencia con las partículas cercanas en las cajas replicadas. La posición de las partículas que salen de la caja de simulación original está descrita por la siguiente ecuación:

$$\vec{r}(i') = \vec{r}(i) - \sum_{k=1}^3 i_k \vec{a}_k \quad (1)$$

Dónde  $\vec{a}_k$  es la base que define el espacio vectorial de la caja de simulación. Mientras  $i_k$  corresponde a la traslación del origen de la celda original a la réplica y  $\vec{r}(i)$  la posición de la partícula  $i$  en la caja original.

Por otro lado, la temperatura del sistema se mantuvo en  $300K$  usando el termostato de Nose/Hoover. Así mismo, se mantuvo el sistema a presión constante a  $1.01 atm$  en las direcciones  $\vec{x}$  y  $\vec{y}$  usando el barostato de Nose/Hoover. Se aplican condiciones de desplazamiento controlada en la dirección  $\vec{z}$  a una velocidad de deformación de  $1 \times 10^{-4}/ps$  y un paso de tiempo de  $0.001ps$ .

La simulación se desarrolla a través de 4 etapas descritas en (Velilla-Díaz et al., 2019b) y el código de la simulación fue implementado en Lammmps (Plimpton, 1995). Los esfuerzos locales fueron estimados con la formulación de ATC usando el paquete USER-ATC de Lammmps propuesto por (Jonathan. Zimmerman et al., 2016) y comparados con la formulación de Hardy propuesta en (Hardy, 1982). Los esfuerzos locales de cada cristal son promediados para estimar el esfuerzo global del cristal y comparados en cada formulación. En la **Figura 10** se muestra el proceso de deformación del cristal hasta la propagación de la fisura.



**Figura 10.** Proceso de deformación uniaxial del cristal de Aluminio bajo tasas de deformación constantes.

## Formulación de cantidades del continuo con ATC

Resse *et al.* (Jones et al., 2016) propusieron el método átomo al continuo (ATC), cuya finalidad fue proveer una herramienta para simular y diseñar materiales nanoestructurados. Este método permite simular sistemas en grandes escalas con detalles atómicos (Jones, Templeton, et al., 2011; Templeton et al., 2010), el promedio de cantidades atómicas para estimar cantidades de campo descritas en la formulación y las teorías del medio continuo (método de grano grueso o coarse-graining en inglés) (Jones, Zimmerman, et al., 2011; Jones & Zimmerman, 2010; J. A. Zimmerman et al., 2004, 2010; J. A. Zimmerman & Jones, 2013) y el acoplamiento de los cálculos de dinámica molecular y elementos finitos (Wagner et al., 2008).

### Esfuerzos locales

El método de grano grueso o “coarse-graining” consiste en un promedio de cantidades atómicas para estimar campos físicos definidos en las teorías de la mecánica del medio continuo. Es así como, ATC provee una alternativa para el cálculo del campo de esfuerzos locales, en este caso, para una superposición completa de los dos dominios atomístico-continuo. El método multiescala ATC configura una modificación de la formulación original de Hardy, basada en una configuración Euleriana/espacial que permite el cálculo del esfuerzo de Cauchy  $\sigma$ . No obstante, ATC representa en su formulación una configuración Lagrangiana/material, particularmente, predilecta en la mecánica de sólidos y en las teorías del medio continuo. En este caso, debido a su configuración permite el cálculo del primer tensor de esfuerzos de Piola-Kirchoff  $S$  desarrollado por Zimmerman et al en (J. A. Zimmerman et al., 2010) y basado en la formulación de Hardy.

El caso de grano grueso implementa el método de mínimos cuadrados para minimizar la diferencia entre la densidad de masa microscópica  $\varrho^*$  y su aproximación  $\sum_J N_J(x)\varrho_J(t)$  basada en la descripción del medio continuo.

$$\min_{\varrho_I} \int_{\Omega} \left\| \varrho^* - \sum_j N_j \varrho_j \right\|^2 dV \Leftrightarrow \sum_j \left[ \int_{\Omega} N_I N_j dV \right] \varrho_j = \int_{\Omega} N_I \varrho dV, \quad (2)$$

dónde  $I$  y  $J$  representan los nodos y  $N_I$  y  $N_J$  son las correspondientes bases. La densidad de masa microscópica es definida como sigue:

$$\varrho^*(x, t) = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \delta(x - x_{\alpha}(t)) \quad (3)$$

cuya expresión está en términos de cantidades atómicas, dónde  $m_{\alpha}$  es la masa de los átomos y  $\delta$  es el operador delta de Dirac. Mientras,  $x$  y  $x_{\alpha}$  representan los puntos en el campo continuo y las posiciones de los átomos, respectivamente. Tomando la ecuación (1) y (2) se resuelve:

$$\sum_j \underbrace{\left[ \int_{\Omega} N_I N_j dV \right]}_{M_{IJ}} \varrho_j = \sum_{\alpha} N_I(x_{\alpha}) m_{\alpha} = \sum_{\alpha} N_{I\alpha} m_{\alpha}, \quad (4)$$

dónde  $N_{I\alpha} = N_I(x_{\alpha})$  es la base evaluada en las posiciones atómicas y  $M_{IJ}$  es la matriz de masa. La densidad de masa en los nodos puede ser obtenida con la proyección de la ecuación (3) como se indica:

$$\varrho_I = \sum_{j, \alpha} M_{IJ}^{-1} N_{j\alpha} m_{\alpha} = \sum_{\alpha} \Delta_{I\alpha} m_{\alpha}, \quad (5)$$

Un término importante es presentado, que se encargará de la localización de la información atómica en nodos específicos. Una función de localización  $\Delta_I = \sum_J M_{IJ}^{-1} N_J$  con  $\Delta_{I\alpha} = \Delta_I(x_{\alpha})$ . Una vez los nodos obtienen sus valores respectivos, las bases son usadas para interpolar los campos en el continuo.

$$\varrho(x, t) = \sum_I N_I(x) \varrho_I(t) = \sum_{I, \alpha} N_I(x) \Delta_{I\alpha}(x_{\alpha}(t)) m_{\alpha}, \quad (6)$$

Un procedimiento similar es requerido para estimar otros campos físicos como la densidad de momento lineal  $p$ .

$$p(x, t) = \sum_{I, \alpha} N_I(x) \Delta_{I\alpha} m_\alpha v_\alpha(t), \quad (7)$$

tanto el campo de densidad de masa como el de momento lineal se pueden expresar en la configuración Lagrangiana/material de la siguiente forma:

$$\rho = \sum_I N_I(x) \rho_I = \sum_{I, \alpha} N_I \Delta_I(X) m_\alpha, \quad (8)$$

$$p(X, t) = \sum_{I, \alpha} N_I(X) \Delta_{I\alpha} m_\alpha v_\alpha(t), \quad (9)$$

dónde  $\Delta_{I\alpha} = \Delta_I(X)$ . Tomando la ecuación (6) y la ecuación (4) se usan para derivar una expresión que permita calcular el tensor de esfuerzos de Cauchy:

$$\frac{\partial}{\partial t} p = \nabla_x \cdot \left( \sigma - \frac{1}{\rho} p \otimes p \right), \quad (10)$$

que al resolver la ecuación (9) se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} p = \frac{1}{2} \sum_{I, \alpha, \beta} (\Delta_{I\alpha} f_{\alpha, \beta} - \Delta_{I\beta} f_{\alpha, \beta}) - \nabla_x \cdot \sum_{I, \alpha} m_\alpha v_\alpha \otimes v_\alpha \Delta_{I\alpha}, \quad (11)$$

dónde  $f_{\alpha, \beta}$  es la fuerza en un átomo  $\alpha$  debido a  $\beta$ , tal que  $f_\alpha = \sum_\beta f_{\alpha, \beta}$ . Para terminar la formulación del tensor de Cauchy es necesario introducir la llamada función de enlace:

$$B_{I\alpha\beta} = \int_0^1 \Delta_I(\lambda x_{\alpha\beta} + x_\beta - x_I) d\lambda, \quad (12)$$

dónde  $x_{\alpha\beta} \equiv x_\alpha - x_\beta$ , tal que

$$-\nabla_x B_{I\alpha\beta} \cdot x_{\alpha\beta} = \Delta_{I\alpha} - \Delta_{I\beta}. \quad (13)$$

Finalmente, combinando la ecuación (9), (10) y (12) se obtiene la expresión para el tensor de Cauchy.

$$\sigma(x, t) = -\frac{1}{2} \sum_{I, \alpha, \beta} f_{\alpha, \beta} \otimes x_{\alpha \beta} B_{I \alpha \beta} N_I(x) - \sum_{I, \alpha} m_{\alpha} w_{\alpha} \otimes w_{\alpha} \Delta_{I \alpha} N_I(x), \quad (14)$$

dónde la velocidad relativa se define como,

$$w_{\alpha} = v_{\alpha} - \sum_I \Delta_{I \alpha} v_I \approx v_{\alpha} - \frac{1}{V_I} \sum_I N_{I \alpha} v_I, \quad (15)$$

similarmente, se obtiene la expresión en configuración Lagrangiana/material que deriva en el primer tensor de Piola-Kirchhoff,

$$S(X, t) = -\frac{1}{2} \sum_{I, \alpha, \beta} f_{\alpha, \beta} \otimes X_{\alpha \beta} B_{I \alpha \beta} N_I(X). \quad (16)$$

Para el cálculo de esfuerzos se usó el paquete de Lammps USER-ATC considerando el nano cristal, únicamente, en el instante antes de la fractura. Esto permite simular un estado cuasi-estático del problema de deformación del nano cristal y obtener el valor de esfuerzo máximo de tensión del cristal antes de la propagación de la fisura. Para esto, el cristal es discretizado con una malla hexaédrica igualmente espaciada en las diferentes direcciones. Adicionalmente, se establece una región interior con una longitud de 2 veces el parámetro de red en cada extremo de la dirección  $\vec{x}$  con el fin de evitar el efecto de la superficie libre en el cálculo y que los autores detallan en (J. A. Zimmerman et al., 2004). Posteriormente, para los esfuerzos es necesario implementar una función de localización Kernel de volumen esférico de orden 3 que permitirá establecer sobre un punto material el cálculo de cantidades del continuo basado en los átomos que estén dentro del radio de acción de la función. En este sentido, se establece un radio  $R_{\alpha} = 3a$  sobre el que se hará el promedio de cantidades atómicas y que contempla el criterio de convergencia hallado por Reese *et al.* en (Jones & Zimmerman, 2010). Para la solución de la integración de la función de enlace  $B_{I \alpha \beta}$  el paquete de Lammps USER-ATC usa una cuadratura de Gauss con 10 puntos. Estos valores son asignados en la malla de elementos finitos a los nodos e interpolados a través de las funciones de forma  $N_I(X)$  trilineales características de los elementos hexaédricos 3D (Hughes, 1978).

Teniendo en cuenta que el método ATC calcula el tensor de esfuerzos en configuración Lagrangiana/material, es decir el primer esfuerzo de Piola-Kirchoff, sería necesario aplicar la



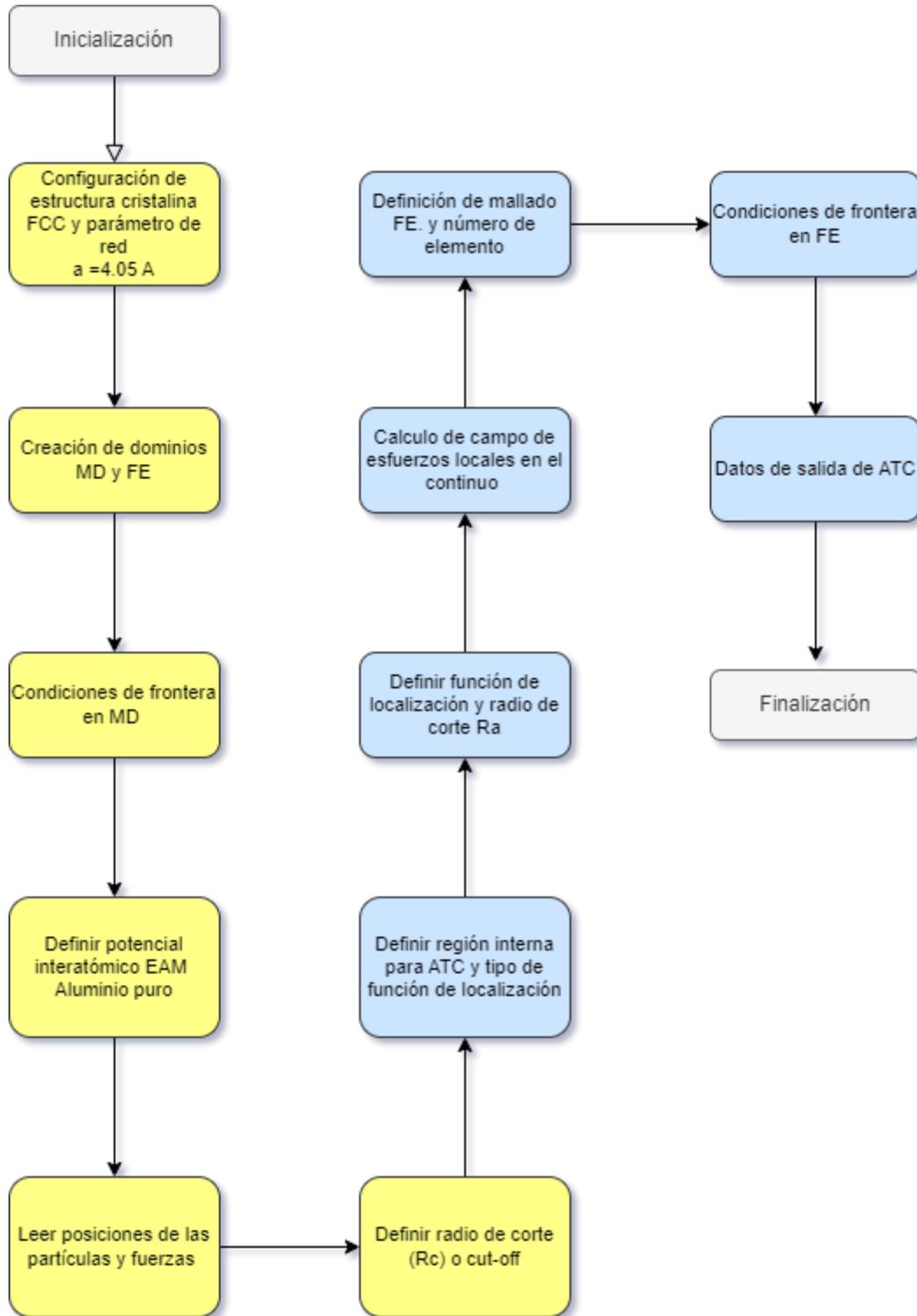
Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



transformada de este para calcular el tensor de Cauchy tal como lo indica Zimmerman *et al.* en (J. A. Zimmerman et al., 2010) para compararlo con los resultados de la formulación de Hardy. No obstante, el tensor de Piola-Kirchoff es consistente con el tensor de Cauchy para el caso de estudio debido a que la contribución de la energía cinética es despreciable comparada con la energía potencial para sistemas en condiciones de temperatura menor a  $\frac{1}{8}$  de la temperatura de fusión del material tal como lo demostró Jones *et al.* en (Jones, Zimmerman, et al., 2011). Con base a esto, el término de la energía cinética de la ecuación (14) puede ser despreciado y definir el esfuerzo de Cauchy como sigue:

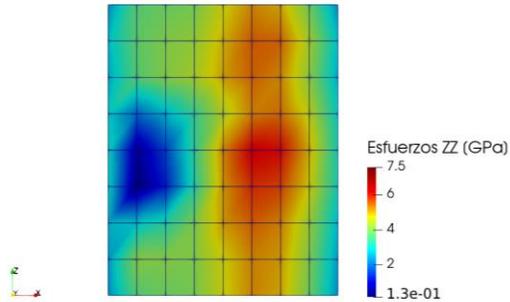
$$\sigma(x, t) = -\frac{1}{2} \sum_{I, \alpha, \beta} f_{\alpha, \beta} \otimes x_{\alpha \beta} B_{I \alpha \beta} N_I(x). \quad (17)$$

Consistente con la definición Lagrangiana del primer esfuerzo de Piola-Kirchhoff que sólo depende de la energía potencial del sistema. A continuación, en la **Figura 11** se detalla el algoritmo desarrollado para implementar el método de ATC con el paquete de Lammps. Para esto, se requirieron dos etapas como se puede observar en la figura. En amarillo se muestra la primera etapa de inicialización de dinámica molecular que implica a grandes rasgos recrear el entorno de simulación del sistema definiendo condiciones de frontera, el potencial interatómico usado y leer los datos de entrada obtenidos a través del ensayo de tensión uniaxial en MD. En verde se detalla el postproceso realizado con el paquete de ATC y que implica la selección de la función de localización, su radio de cálculo y la definición de la malla para interpolar los datos de salida del continuo. Estos datos son post-procesados a través del software libre Paraview (Ahrens et al., 2005).

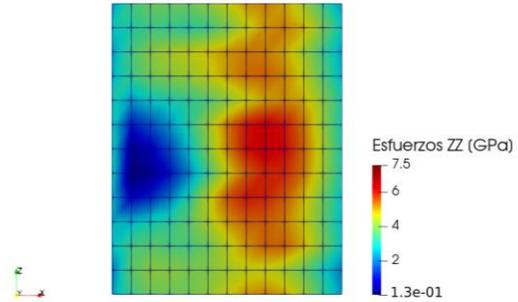


**Figura 11.** Procedimiento para implementar el método “Atom-to-continuum”

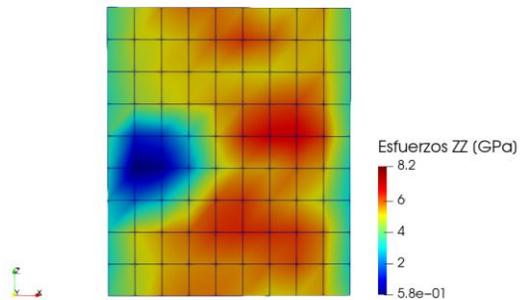
### 3.3. Resultados.



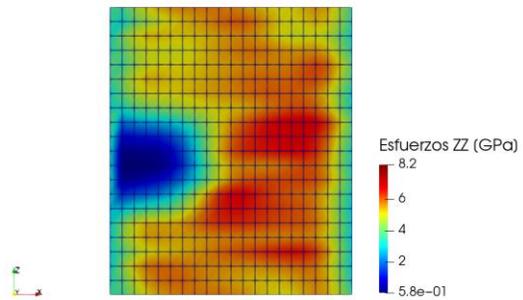
(a) Tamaño de grano 3.2 nm con 512 elementos



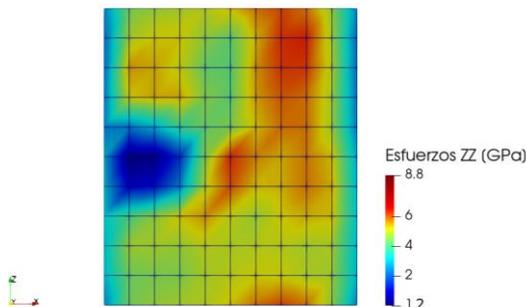
(b) Tamaño de grano 3.2 nm con 1728 elementos



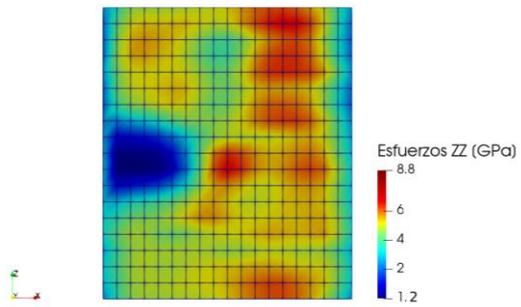
(c) Tamaño de grano 4.8 nm con 648 elementos



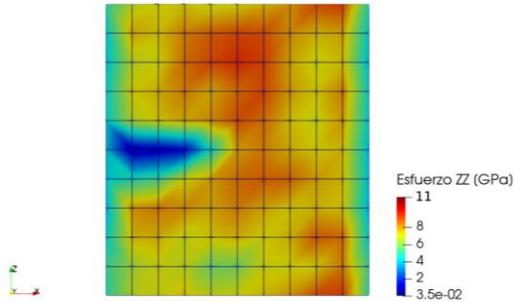
(d) Tamaño de grano de 4.8 nm con 6000 elementos



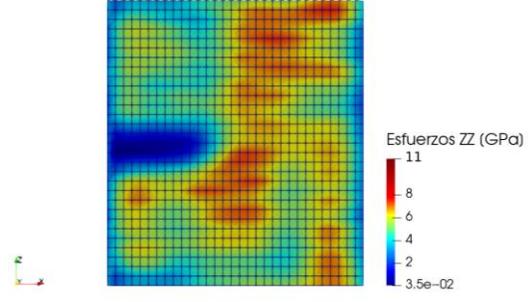
(e) Tamaño de grano 6 nm con 800 elementos



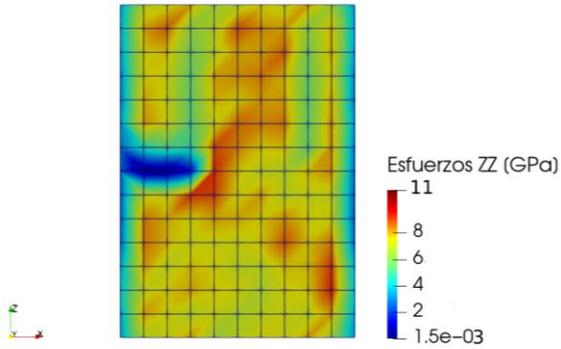
(f) Tamaño de grano 6 nm con 5184 elementos



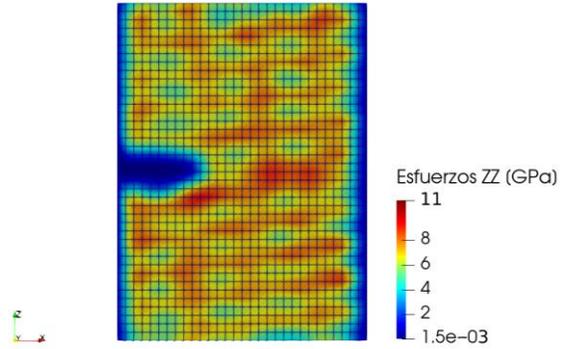
(g) Tamaño de grano 8.1 nm con 400 elementos



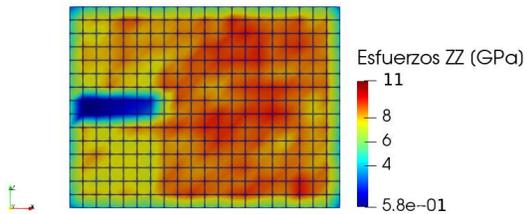
(h) Tamaño de grano 8.1 nm con 15376 elementos



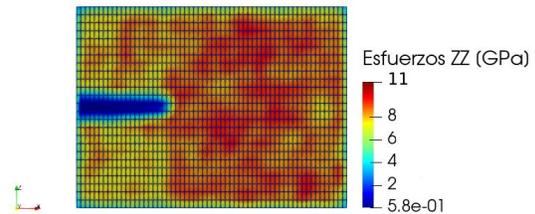
(i) Tamaño de grano 16.2 nm con 1120 elementos



(j) Tamaño de grano de 16.2 nm con 24000 elementos



(k) Tamaño de grano 24.3 nm con 2400 elementos

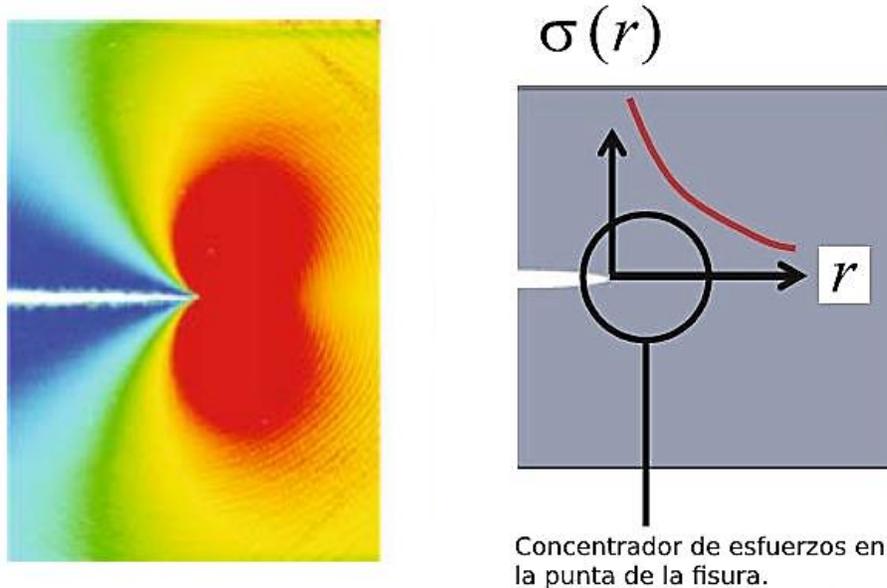


(l) Tamaño de grano 24.3 nm con 81000 elementos

**Figura 12.** Campo de esfuerzos locales en monocristales de Aluminio con fisura de borde para diferentes tamaños de grano.

En la **Figura 12** se puede observar la distribución de los esfuerzos locales en monocristales de Aluminio de diferentes tamaños de grano usando el método “Atom-to-continuum”. Se observa en los cristales con mejor resolución de la malla de elementos finitos una concentración de altos esfuerzos alrededor de la punta de la fisura lo que es consistente con la teoría del medio continuo en donde la fisura representa un concentrador de esfuerzos.

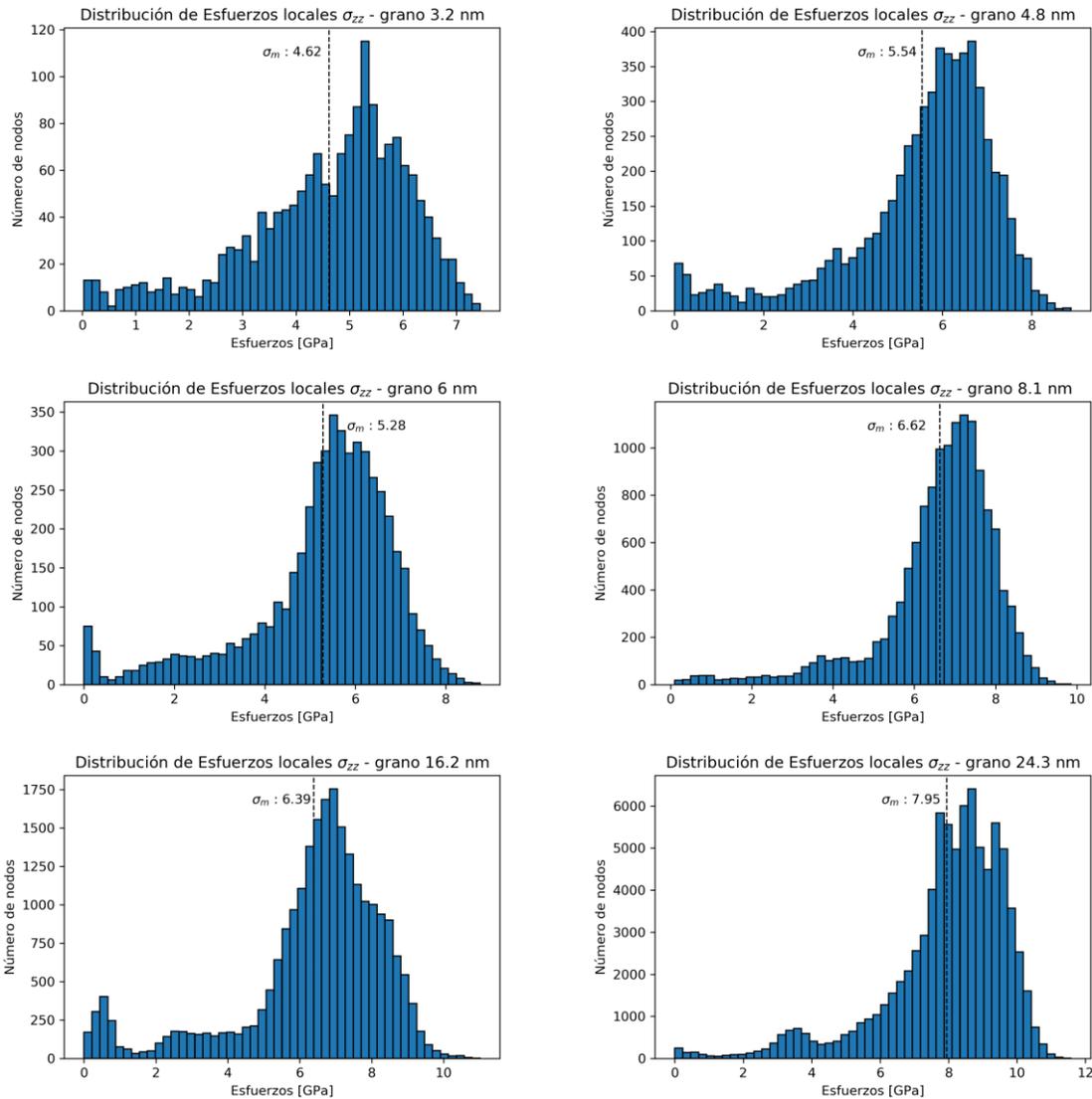
En la **Figura 13** se puede observar los comportamientos característicos de los materiales para la presencia de fisuras y cargas externas en modo I. En la **Figura 13**, el autor Buehler en (Buehler, 2008) detalla como la zona de las superficies libres de la fisura no generan tracción bajo la presencia de una fuerza de tensión externa. Así mismo, expresa que los esfuerzos son máximos en la punta de la fisura y disminuyen conforme se alejan de ella en la dirección de posible propagación de la fisura. Estos comportamientos comúnmente esperados en los estudios de mecánica de la fractura para fisuras distan en ciertas regiones de los resultados obtenidos con ATC para diferentes tamaños de grano y que se pueden evidenciar en la **Figura 12**. Una de estas diferencias destacadas es que las zonas libres de tracción con ATC se observan rangos de esfuerzos altos. El refinamiento del tamaño de los elementos permite una mejora en los resultados de estas zonas, pero siguen siendo esfuerzos altos en un rango de 4 a 6 GPa.



**Figura 13.** Campo de esfuerzos característico para un paso de deformación en ensayo de tensión en modo I con fisuras. Tomado de (Buehler, 2008)

Para verificar los resultados del campo de esfuerzos locales de cada tamaño de grano y compararlos posteriormente con los resultados de la formulación de Hardy, es necesario calcular el promedio de los esfuerzos de todos los nodos del cristal. En la **Figura 14** la distribución de esfuerzo locales corresponde al mayor número de nodos de cada tamaño de grano y se observa

una distribución sesgada negativa, ya que la mayor frecuencia se concentra en los valores de esfuerzos más altos.



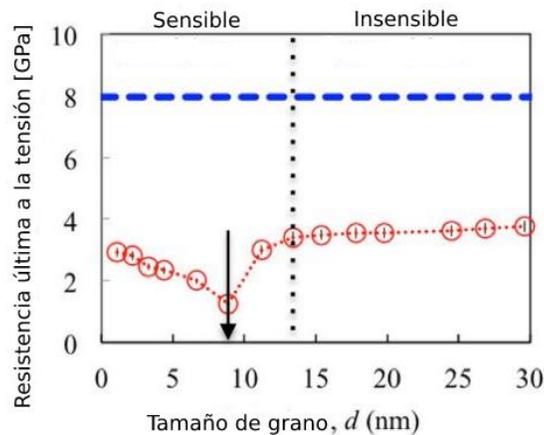
**Figura 14.** Distribución de esfuerzos locales para monocristales de Aluminio con diferentes tamaños de grano implementando ATC.

Adicionalmente, en la **Tabla 4** se calcula el promedio de los esfuerzos para hallar el global del sistema como se había mencionado, los esfuerzos máximos y la desviación estándar de tal forma que a través de la estadística descriptiva se pueda comparar con los resultados obtenidos con la formulación de Hardy para cada tamaño de grano.

**Tabla 4.** Resultados de la implementación del método “Atom-to-Continuum”. Esfuerzo máximo, esfuerzo global y desviación estándar poblacional.

Tamaño de grano [nm]	$\sigma_{max}$ [GPa]	$\sigma_m$ [GPa]	$s_d$ [GPa]
3.2	7.56	4.62	1.51
4.8	8.18	5.54	1.69
6	8.75	5.28	1.61
8.1	10.58	6.62	1.96
16.2	11.01	6.39	2.03
24.3	11.54	7.95	1.80

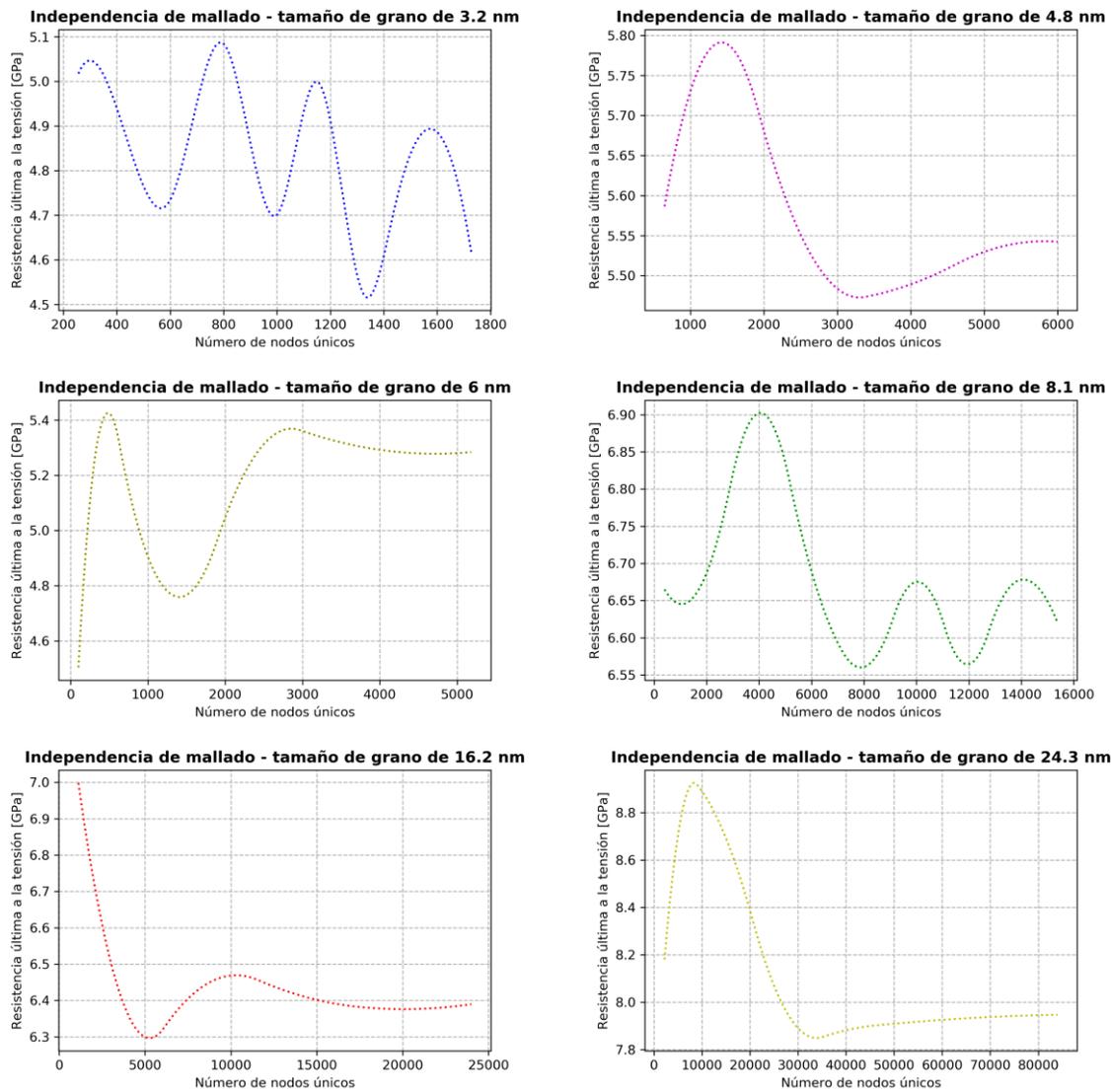
La **Tabla 4** muestra como la resistencia media global del Aluminio depende del tamaño de grano, aún para un monocristal fisurado. Estos resultados contrastan con los obtenidos por (Xu & Dávila, 2017b) que muestran independencia del tamaño de grano para el caso de monocristales de Aluminio sin defectos. Comparado con el caso de policristales con tamaños de grano medio, los resultados de ATC muestran diferencia con la zona sensible e insensible determinada por Xu y Dávila. Adicionalmente, el punto de inflexión de la resistencia para la zona sensible al tamaño de grano no es coincidente con los resultados de ATC. En la **Figura 15** se pueden observar los resultados para los monocristales y policristales y las zonas descritas anteriormente para policristales.



**Figura 15.** Dependencia de la resistencia última a la tensión con el tamaño de grano para monocristales en azul y policristales en rojo. Adaptado de (Xu & Dávila, 2017b)

Para corroborar la convergencia de los resultados en FE se evaluó la independencia del mallado con la resistencia global del Aluminio en cada tamaño de grano evaluado. Los resultados se pueden observar en la **Figura 16** mostrando convergencia para un mallado más fino en todos los tamaños de grano. Para el caso de tamaños de grano como 3.2 nm y 8.1 nm la convergencia se da para un mallado muy fino, cercano al número de átomos del sistema. Debido a que el método

“Atom-to-Continuum” implementa un algoritmo en serie para la etapa de solución de interpolación de la malla, el tiempo de simulación aumenta considerablemente a un mayor número de elementos. En el caso del cristal de 24.3 nm con 188720 átomos y 2400 elementos se requieren 35 minutos de cómputo, mientras, el mismo cristal con 84000 elementos requiere 394 minutos de cómputo. Estas simulaciones se llevaron a cabo en la estación de trabajo de la Universidad Austral de Chile que cuenta con 10 núcleos, 20 procesadores lógicos y 128 Gb de memoria RAM.



**Figura 16.** Análisis de convergencia de la resistencia última a la tensión con el número de nodos



### 3.4. Conclusiones

- La resistencia última a la tensión de monocristales con fisura de borde con longitudes de fisura proporcionales a su tamaño de grano exhibe dependencia del tamaño de grano.
- La resistencia del tamaño de grano de 24.3 nm es 72% mayor que la del tamaño de grano menor, 3.2 nm.
- En los monocristales fisurados disminuye la resistencia con respecto a lo observado por otros investigadores para monocristales perfectos. Sin embargo, a diferencia de los monocristales perfectos, los cristales fisurados muestran dependencia del tamaño de grano.
- “Atom-to-Continuum” permite estimar la resistencia del material usando las posiciones y las fuerzas obtenidas de la dinámica molecular.

## Capítulo IV. Comparación de ATC con Hardy.

---

### 4.1. Introducción.

Notables esfuerzos se han hecho en los últimos tiempos por los investigadores para cuantificar cantidades del continuo en materiales nanoestructurados usando los resultados de la dinámica molecular (Hardy, 1982; Shiari & Miller, 2016; Tsai, 1979; Xiong et al., 2012b; J. A. Zimmerman et al., 2004). En este sentido, la formulación de Hardy representó un trabajo importante que logró evadir el uso de las funciones de Delta de Dirac e implementó funciones de localización de valores y rangos finitos. La función de localización se encarga de distribuir las diferentes contribuciones atómicas a los campos definidos en el medio continuo, como es el caso de los esfuerzos. La formulación de Hardy se basa originalmente en una configuración euleriana o espacial donde los volúmenes de control son fijos en el espacio que ocupa la materia en un estado actual. Esta configuración euleriana repercute en la definición del esfuerzo de Cauchy que contiene un término que proviene de la energía potencial del volumen control y otro cinético que proviene del flujo de la cantidad de movimiento sobre el mismo volumen. Por su parte, el método “Atom-to-continuum” implementa en una configuración lagrangiana o material la formulación de Hardy, usando la dinámica molecular y las funciones de localización para integrarlo en la solución con elementos finitos. Este enfoque lagrangiano permite la separación de la contribución del potencial y la cinética a cálculo de esfuerzos (J. A. Zimmerman et al., 2010).

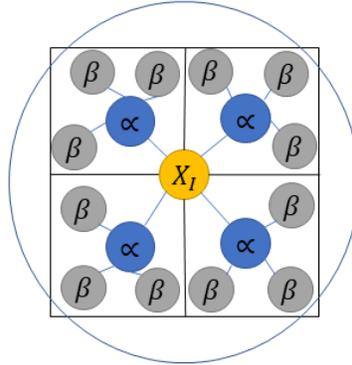
### 4.2. Esfuerzos locales estimados con ATC

A pesar de que en la configuración lagrangiana cantidades como el esfuerzo está expresado por el primero tensor de esfuerzos de Piola-Kirchhoff  $S$  y en la formulación de Hardy este se expresa a través del esfuerzo de Cauchy  $\sigma$ , Zimmerman *et al.* (J. A. Zimmerman et al., 2010) demostró que en simulaciones a temperaturas menores a un octavo de la temperatura de fusión del material las contribuciones de la energía cinética son despreciables y los esfuerzos de P-K y Cauchy son consistentes. De acuerdo con lo anterior, el esfuerzo de Cauchy en Atom-to-Continuum es análogo al de Hardy y se expresa así en su **configuración material**:

$$\sigma(X, t) = -\frac{1}{2} \sum_{I, \alpha, \beta} f_{\alpha, \beta} \otimes X_{\alpha\beta} B_{I\alpha\beta} N_I(X), \quad (18)$$

dónde  $X_I$  es el punto material sobre el que se hace el cálculo de esfuerzos y  $B_{I\alpha\beta}$  es la función de enlace propuesta por Hardy (Hardy, 1982):

$$B_{I\alpha\beta}(X) = \int_0^1 \Delta_I(\lambda X_{\alpha\beta} + X_{\beta} - X_I) d\lambda. \quad (19)$$



**Figura 17.** Esquema de volumen representativo para determinar propiedades locales en un punto material  $X_I$  asignado a un nodo  $I$  de la malla.

En la **Figura 17** se presenta un esquema representativo de lo que significa la función de enlace. Esta función  $B_{I\alpha\beta}(X)$  representa la fracción del enlace  $\alpha$  y  $\beta$  del volumen que contribuyen en sus propiedades atómicas al punto material  $X_I$  para el cálculo de propiedades del continuo. Por su parte,  $\Delta_I$  es la función de localización o Kernel de spline cúbico que tiene ciertas características y se define en la ecuación 20 definida en (Aluru, 1999),

$$\Delta_I(X) = \begin{cases} \frac{2}{3} - z^2 \left(1 - \frac{z}{2}\right) & 0 \leq z \leq 1, \\ \frac{1}{6}(2 - z)^3 & 1 \leq z \leq 2, \end{cases} \quad (20)$$

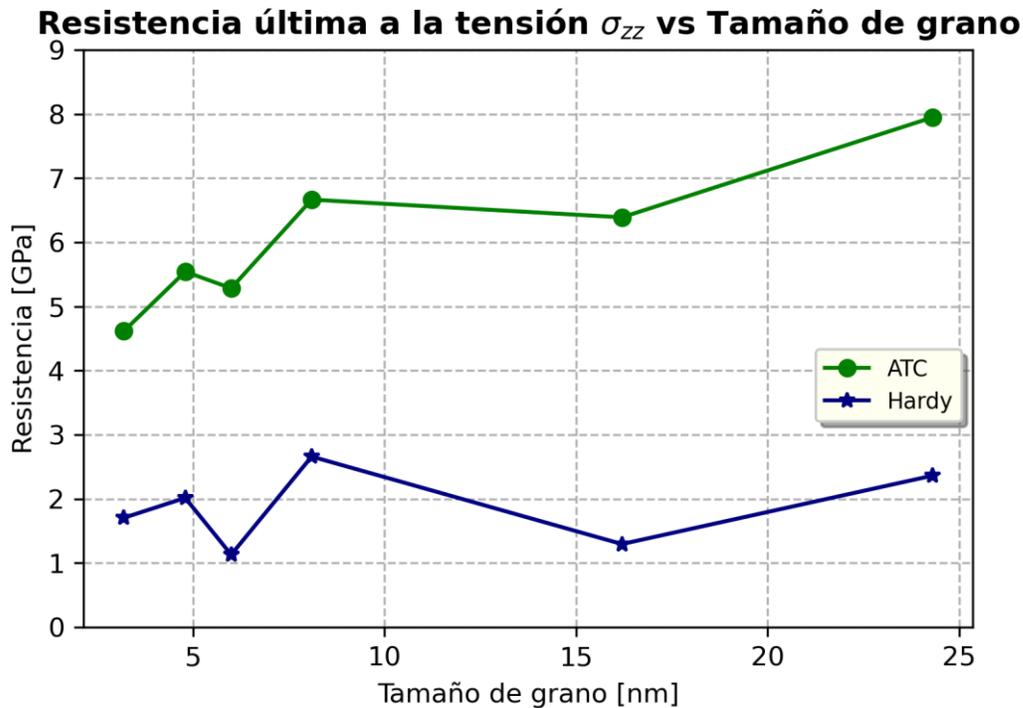
dónde  $a$  es el parámetro de suavizado expresado como sigue:

$$z = \frac{|X_{\alpha\beta} + X_{\beta}|}{h}, \quad (21)$$

la función de localización por definición es normalizada, tiene unidades inversas de volumen y siempre es positiva. Por otro lado, la longitud de suavizado  $h$  que se usó en el cálculo es de 3 veces el parámetro de red del Aluminio, es decir  $3a = 3 * 4.05 \text{ \AA}$ . Sobre este radio de corte  $R_a$  definido por Zimmerman et al. en (J. A. Zimmerman et al., 2004) se realizaron los cálculos de

promedios de cantidades atómicas. Además, se seleccionó  $R_a > R_c$  el criterio de convergencia de los autores para esfuerzos altos expuesto en (Jones & Zimmerman, 2010).

#### 4.3. Verificación de los resultados de esfuerzos globales de ATC con Hardy



**Figura 18.** Comparación de los esfuerzos globales calculados con ATC y la formulación de Hardy para diferentes tamaños de grano.

En la **Figura 18** se observan los esfuerzos globales para seis diferentes tamaños de grano de monocristales de Aluminio con fisura de borde y sometidos a tensión uniaxial en la dirección  $\bar{z}$ . En la figura se exponen los cristales calculados con un mayor número de elementos usando ATC y se comparan con los resultados de la formulación de Hardy. Se observa un comportamiento similar en las curvas de resistencia última versus tamaño de grano. Sin embargo, los valores difieren en porcentajes mayores al 100%. En la **Tabla 5** se especifican los valores reportados en la literatura (Velilla Diaz, 2019; Velilla-Díaz et al., 2019a; Velilla-Díaz & Zambrano, 2021), se compararon con los hallados con ATC en la presente investigación y se calculó la diferencia relativa porcentual de los dos métodos. Adicionalmente, se calculó el error cuadrático medio (*ECM*) reportando un valor de  $18.55 \text{ GPa}^2$  que indica un lejano ajuste de la curva de resultados de ATC con los obtenidos en la formulación de Hardy.

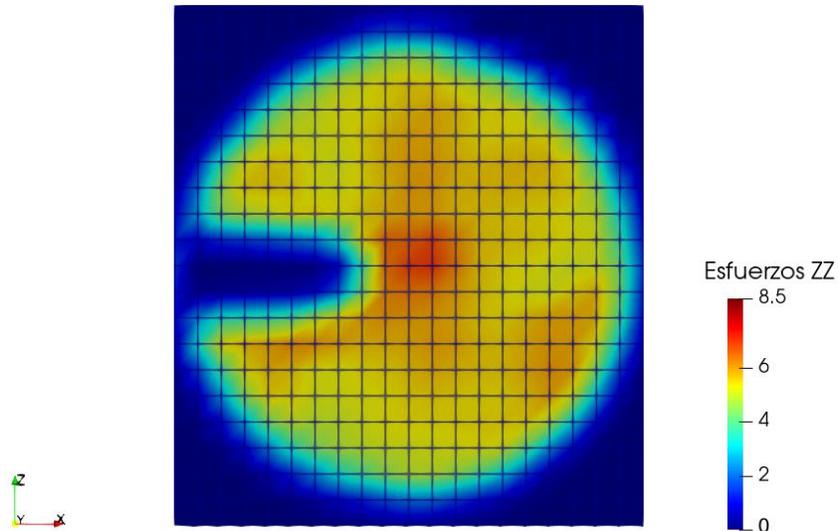
**Tabla 5.** Comparación de esfuerzos globales entre ATC y Hardy.

Tamaño de grano [nm]	$\sigma_{m-ATC}$ [GPa]	$\sigma_{m-Hardy}$ [GPa]	Diferencia relativa [%]
<b>3.2</b>	4.62	1.71	170.6
<b>4.8</b>	5.54	2.02	175.01
<b>6</b>	5.28	1.13	367.35
<b>8.1</b>	6.62	2.66	150.59
<b>16.2</b>	6.39	1.29	393.01
<b>24.3</b>	7.95	2.36	236.50

#### 4.4. Discusión

Aunque con el refinamiento de la malla de elementos finitos se obtiene una mejor distinción y cálculo de esfuerzos alrededor de la punta de la fisura, los esfuerzos en las zonas libres de tracción siguen siendo altos a comparación con los calculados con el método de Hardy y lo que dice la teoría mostrada en la **Figura 13**. Esto es contrastante con hallazgos previos de (Velilla-Díaz et al., 2019a) y de otros investigadores, incluso para cristales perfectos (Xu & Dávila, 2017b, 2018) que usan potenciales interatómicos EAM.

Recientemente, Stepanova et al. (Stepanova & Bronnikov, 2020) evaluaron los campos de esfuerzos en el Cobre (Cu) y el Aluminio (Al) para una placa con fisura central bajo condiciones de carga mixta (modo I y modo II) y observaron una distribución de esfuerzos de acuerdo con la teoría del medio continuo y la mecánica de la fractura lineal elástica en las superficies libres de tracción como el caso de los planos de la fisura. Estas diferencias se podrían atribuir a la configuración metodológica de la etapa de dinámica molecular, ya que el paquete USER-ATC recibe la información de las posiciones y fuerzas del sistema en un punto de deformación específico. De acuerdo con esto, se cree que al usar una configuración lagrangiana-material se requiere del punto inicial de referencia del monocristal en estado perfecto y no deformado para obtener valores más cercanos a los de la formulación de Hardy. Esto debido a la energía potencial en las superficies de la fisura preexistente es mayor tal como lo demuestra Zimmerman *et al* en su trabajo (J. A. Zimmerman et al., 2004). Adicionalmente, se requiere implementar una condición de frontera de deformación de campo lejana como se puede observar en la **Figura 19** para una mejor resolución en la obtención de la localización de esfuerzos en la punta de la fisura.



**Figura 19.** Campos de esfuerzos en un monocristal de Aluminio de 8.1 nm con 2000 elementos implementando regiones internas y externas de deformación de campo lejano.

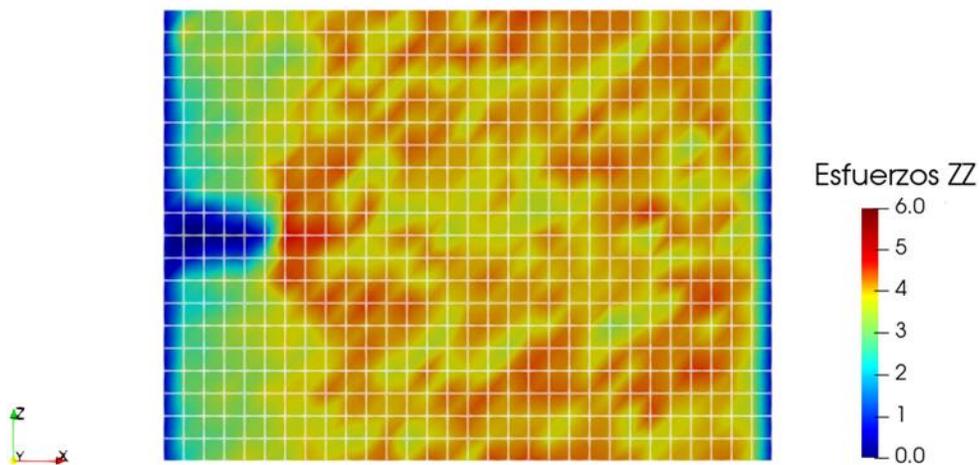
**Tabla 6.** Comparación de esfuerzos globales entre ATC y Hardy aplicando la metodología de regiones y campos lejanos en un monocristal de 8.1 nm.

Tamaño de grano [nm]	$\sigma_{m-ATC}$ [GPa]	$\sigma_{m-Hardy}$ [GPa]	Diferencia relativa [%]
8.1	3.21	2.66	20.67

Se puede observar en la **Tabla 6** que aplicando la metodología que plantean los autores a uno de los monocristales es posible obtener resultados más cercanos a los obtenidos usando la formulación de Hardy. Esta diferencia relativa porcentual se ajusta a lo que otros autores han encontrado en sus investigaciones como es el caso de (Guan et al., 2020; Yue et al., 2022). En (Guan et al., 2020) los autores también obtienen diferencias del 23% en la resistencia última a la tensión del material  $CeO_2$  para una fisura central. Esta diferencia radica en el promedio de los esfuerzos locales calculados con ATC con respecto al esfuerzo del teorema del Virial. Adicionalmente, se observa que en MD la resistencia alcanza su valor máximo a una deformación del 6.9%, mientras, en ATC se alcanza el valor máximo a 2.3% de deformación, es decir una diferencia del 200% en el estado de deformación del material a la que se alcanza su resistencia última que a su vez difiere como se mencionó anteriormente siendo mayor en el cálculo con ATC. También se observó que la resistencia del material sin fisuras calculada con ATC es de 16 GPa, mientras que, con fisura central es de 15 GPa. No obstante, el teorema del Virial para el material sin fisura estimó un esfuerzo cercano a los 16 GPa y con fisura central de aproximadamente 12

GPa. Por otro lado, en (Yue et al., 2022) se observan esfuerzos altos en las zonas libres de tracción con esfuerzos locales en un rango de 4 a 9 GPa. Cabe aclarar que, la formulación de Hardy fue validada con los resultados del Virial en (Velilla Diaz, 2019). Sin embargo, estos resultados de  $CeO_2$  implementando ATC, al igual que los de la presente investigación usando el potencial de Medelev para el Aluminio, se alejan de los resultados obtenidos con el teorema del Virial y la formulación de Hardy, respectivamente.

Haciendo uso del potencial interatómico desarrollado por Winey *et al.* en su trabajo (Winey et al., 2010), se obtienen resultados similares a los esperados según la teoría del medio continuo y los resultados validados en (Velilla Diaz, 2019) usando la formulación de Hardy y el teorema del Virial. En la **Figura 20** se observa en la punta de la fisura el valor más alto de esfuerzo que gradualmente disminuye en la posible ruta de propagación de la fisura. Las regiones encima y debajo de la fisura no presentan esfuerzos cero como lo sugiere la teoría, pero si son menores a los que se generan alrededor de la fisura. Este comportamiento obedece a lo que se conoce como superficies libres de tracción. Sin embargo, se observa que el tamaño de los elementos en las regiones superior e inferior no permite una mejor aproximación al comportamiento esperado (libres de tracción).

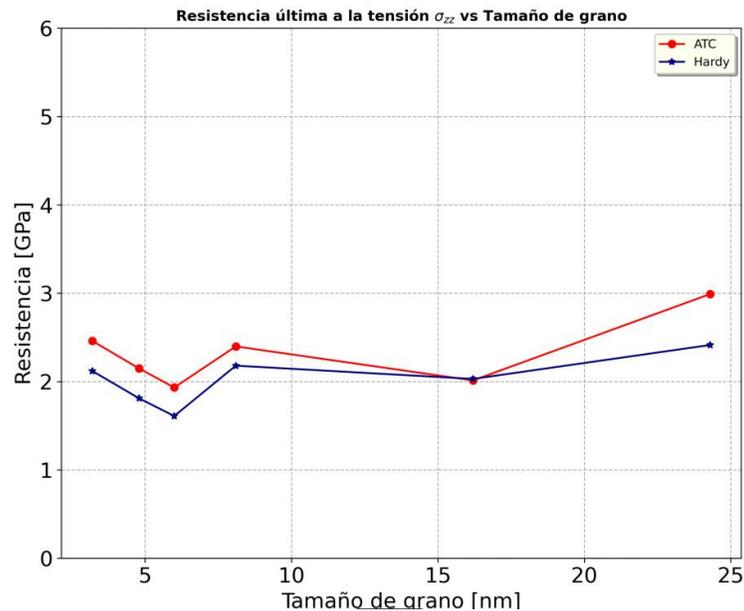


**Figura 20.** Campos de esfuerzos en un monocristal de Aluminio de 24 nm con 6000 elementos implementando el potencial interatómico WKG para Aluminio.

En la **Tabla 7** se resumen los valores obtenidos con el potencial WKG y se observa que la diferencia relativa porcentual entre los esfuerzos disminuyó hasta valores aceptables. Estos valores se ajustan a las diferencias relativas encontradas en otras investigaciones para otros materiales como es el caso de (Guan et al., 2020; Yue et al., 2022).

**Tabla 7.** Comparación de esfuerzos globales entre ATC y Hardy usando el potencial interatómico WKG.

Tamaño de grano [nm]	Diferencia relativa [%]
3.2	16.05
4.8	18.69
6	20.04
8.1	10.00
16.2	0.844
24.3	21.3



**Figura 21.** Comparación de los esfuerzos globales calculados con ATC y la formulación de Hardy para diferentes tamaños de grano usando el potencial interatómico WKG.

En la **Figura 21** se puede observar que el comportamiento de las curvas para ambos métodos es similar usando el potencial interatómico WKG citado anteriormente. Las diferencias porcentuales en los tamaños de grano evaluados se reducen de más de 100% a un rango entre 21% y 0.84% lo que es aceptable. Adicionalmente, se observa que los valores de ATC son mayores a los valores por el método de Hardy. Lo anterior, se puede atribuir a que el método de Hardy configura cada átomo como un punto material para el cálculo de esfuerzos mientras que el método de ATC depende de la resolución de la malla para el cálculo de esfuerzos. Adicional a esto, la zona de la fisura se encuentra conectada en el mallado, dónde hay nodos con esfuerzos muy altos situados alrededor de la punta de la fisura y nodos en dónde no existen átomos por lo que tendrán esfuerzos cero. La interpolación de valores entre estas regiones genera zonas de esfuerzos promedios que no corresponden con la teoría de mecánica del medio continuo.



Algunas desventajas del método se pueden observar en una malla con pocos elementos, dónde, los nodos pueden encontrarse en puntos intermedios de la punta de la fisura y el borde contrastando esfuerzos locales muy altos y esfuerzos locales muy bajos, es decir, gradientes grandes que requieren una resolución de la malla mucho más fina para una mejor interpolación de los valores nodales. Sin embargo, una malla más fina puede significar que cada nodo dependa de la información de pocos átomos. Con la configuración usada, fue posible obtener una mejor resolución en cada nodo y hacer simultáneamente el refinamiento del mallado como sugiere Jones et al. en (Jones et al., 2016). No obstante, con esta condición observamos que los esfuerzos promedios tienen diferencias relativas aceptables, pero aún no son bien calculadas estas superficies libres de tracción.

#### 4.5. Conclusiones

- El método “Atom-to-Continuum” presenta una herramienta computacional que integra la dinámica molecular y el método de elementos finitos. Sin embargo, los resultados presentan un *ECM* de  $18.55 \text{ GPa}^2$  superior al admitido para Ingeniería. Para obtener resultados con diferencias relativas menores como se demostró es necesario aplicar condiciones de frontera específicas y forzar el modelo.
- El comportamiento entre las dos curvas es similar, pero para ambos casos la resistencia última a la tensión demuestra dependencia del tamaño de grano.
- La energía por deformación almacenada en el material con sus posiciones y fuerzas influye en el cálculo de esfuerzos en las zonas cercanas a la punta de la fisura. Por esto la variación de estas cantidades repercute en los resultados.
- El potencial influye en el cálculo de esfuerzos y la exactitud del método “Atom-to-Continuum”.
- El potencial WKG exhibe diferencias relativas aceptables con respecto a las obtenidas con el potencial de Mendeleev.

## Conclusiones Generales y futuros trabajos

- El método “Atom-to-Continuum” representa una herramienta computacional que logra integrar los resultados de dinámica molecular y el método de elementos finitos para calcular cantidades del continuo, en este caso esfuerzos locales. Sin embargo, los resultados presentan un  $ECM$  de  $18.55 \text{ GPa}^2$  con respecto a la formulación de Hardy superior a un error aceptable de  $ECM \cong 0$  y que es el buscado para diseño en Ingeniería. Para mejorar los resultados es necesario aplicar condiciones de frontera de campo lejano para lograr un ajuste de los resultados.

### 5.1. Objetivo específico I:

- El método “Atom-to-continuum” supera en un 5% de calificación al método “Concurrent atom-to-continuum” siendo la codificación un factor determinante en la evaluación.
- Las ecuaciones rectoras en “Concurrent atom-to-continuum” obtuvieron una calificación mayor debido a que es posible usar las mismas ecuaciones para ambos dominios en su formulación lo que genera una ventaja numérica en el cálculo.
- Los métodos XFEM y CADD obtuvieron una puntuación del 60% debido a que no se encuentran codificados en ningún lenguaje de programación y el acoplamiento de los dominios requiere de una zona cohesiva o de interfaz con ecuaciones suplementarias para integrar las dos escalas. XFEM por su parte requiere un refinamiento de malla hasta nivel nano para acoplar con el sistema de átomos y CADD es un método concebido para el estudio de dislocaciones.

### 5.2. Objetivo específico II:

- La resistencia última a la tensión de monocristales con fisura de borde con longitudes de fisura proporcionales a su tamaño de grano exhibe dependencia del tamaño de grano.
- La resistencia del tamaño de grano de 24.3 nm es 72% mayor que la del tamaño de grano menor, 3.2 nm.
- En los monocristales fisurados disminuye la resistencia con respecto a lo observado por otros investigadores para monocristales perfectos. Sin embargo, a diferencia de los monocristales perfectos, los cristales fisurados muestran dependencia del tamaño de grano.
- “Atom-to-Continuum” permite estimar la resistencia del material usando las posiciones y las fuerzas obtenidas de la dinámica molecular.

### 5.3. Objetivo específico III:

- El método “Atom-to-Continuum” presenta una herramienta computacional que integra la dinámica molecular y el método de elementos finitos. Sin embargo, los resultados presentan un  $ECM$  de  $18.55 GPa^2$  superior al admitido para Ingeniería.
- El comportamiento entre las dos curvas es similar, pero para ambos casos la resistencia última a la tensión demuestra dependencia del tamaño de grano.
- La energía por deformación almacenada en el material con sus posiciones y fuerzas influye en el cálculo de esfuerzos en las zonas cercanas a la punta de la fisura. Por esto la variación de estas cantidades repercute en los resultados.
- El potencial influye en el cálculo de esfuerzos y la exactitud del método “Atom-to-Continuum”.
- El potencial WKG exhibe diferencias relativas aceptables con respecto a las obtenidas con el potencial de Mendeleev.

### 5.4. Futuros trabajos.

- Implementar el método de “Atom-to-continuum” simulando el ensayo de tensión en DM y aplicando ATC en la marcha de la simulación.
- Implementar ATC siguiendo la misma metodología de sus autores en la DM y comparar cómo se comporta con potenciales más simples como el de Lennard-Jones.
- Desarrollar los algoritmos y códigos propios para ATC.
- Implementar ATC en bicristales para observar el efecto de la frontera de grano en el cálculo de propiedades del continuo.
- Implementar ATC para el estudio de fatiga en cargas cíclicas sobre monocristales y bicristales.
- Implementar y programar el método de CAC para el problema estudiado y compararlo con los resultados de ATC y Hardy.



## Bibliografía.

---

- Ahrens, J., Geveci, B., & Law, C. (2005). ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization. In *Visualization Handbook*. Elsevier.
- Aluru, N. R. (1999). Reproducing kernel particle method for meshless analysis of microelectromechanical systems. *Computational Mechanics*, 23(4), 324–338. <https://doi.org/10.1007/s004660050413>
- Budarapu, P. R., & Rabczuk, T. (2017). Multiscale Methods for Fracture: A Review. *Journal of the Indian Institute of Science*, 97(3), 339–376. <https://doi.org/10.1007/s41745-017-0041-5>
- Buehler, M. J. (2008). *Atomistic Modeling of Mechanical Failure*. Springer.
- Chakraborty, S., & Ghosh, S. (2021). A concurrent atomistic-crystal plasticity multiscale model for crack propagation in crystalline metallic materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 379, 113748. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113748>
- Chandra, S., Kumar, N. N., Samal, M. K., Chavan, V. M., & Patel, R. J. (2016). Molecular dynamics simulations of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies. *Computational Materials Science*, 117, 518–526. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.02.032>
- DeCelis, B., Argon, A. S., & Yip, S. (1983). Molecular dynamics simulation of crack tip processes in alpha-iron and copper. *Journal of Applied Physics*, 54(9), 4864–4878. <https://doi.org/10.1063/1.332796>
- Diaz, A. (2020). *A CONCURRENT ATOMISTIC-CONTINUUM METHOD FOR MASSIVELY PARALLEL SIMULATION OF NON-EQUILIBRIUM SOLIDS*. UNIVERSITY OF FLORIDA.
- Ding, J., Zheng, H. ran, Tian, Y., Huang, X., Song, K., Lu, S. qing, Zeng, X. guo, & Ma, W. S. (2020). Multi-scale numerical simulation of fracture behavior of nickel-aluminum alloy by coupled molecular dynamics and cohesive finite element method (CFEM). *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 109(May), 102735. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2020.102735>
- Elliott, J. A. (2011). Novel approaches to multiscale modelling in materials science. *International Materials Reviews*, 56(4), 207–225. <https://doi.org/10.1179/1743280410Y.0000000002>
- Ghosh, S., & Zhang, J. (2017). Elastic crack propagation model for crystalline solids using a self-consistent coupled atomistic–continuum framework. *International Journal of Fracture*, 208(1–2), 171–189. <https://doi.org/10.1007/s10704-017-0232-0>



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



- Guan, T., Sun, Y., Yang, Z., Jing, Y., & Guo, W. (2020). Multi-scale simulations of fracture behavior in CeO<sub>2</sub>. *Ceramics International*, 46(18), 28613–28620. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.08.020>
- Hardy, R. J. (1982). Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: Shock waves. *The Journal of Chemical Physics*, 76(1), 622–628. <https://doi.org/10.1063/1.442714>
- Hughes, T. J. R. (1978). *The Finite Element Method Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis* (Prentice-Hall, Ed.).
- Jones, R. E., Templeton, J., & Zimmerman, Jonathan. (2016). Principles of Coarse-Graining and Coupling Using the Atom-to-Continuum Method. In *Springer Series in Materials Science* (Vol. 245, pp. 441–468). [https://doi.org/DOI 10.1007/978-3-319-33480-6\\_7](https://doi.org/DOI 10.1007/978-3-319-33480-6_7)
- Jones, R. E., Templeton, J. A., & Rebold, T. W. (2011). Simulated real-time detection of a small molecule on a carbon nanotube cantilever. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 8(8), 1364–1384. <https://doi.org/10.1166/jctn.2011.1822>
- Jones, R. E., & Zimmerman, J. A. (2010). The construction and application of an atomistic J-integral via Hardy estimates of continuum fields. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 58(9), 1318–1337. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2010.06.001>
- Jones, R. E., Zimmerman, J. A., Oswald, J., & Belytschko, T. (2011). An atomistic J-integral at finite temperature based on hardy estimates of continuum fields. *Journal of Physics Condensed Matter*, 23(1). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/23/1/015002>
- Kohlhoff, S., Gumbsch, P., & Fischmeister, H. F. (1991). Crack propagation in b.c.c. crystals studied with a combined finite-element and atomistic model. *Philosophical Magazine A: Physics of Condensed Matter, Structure, Defects and Mechanical Properties*, 64(4), 851–878. <https://doi.org/10.1080/01418619108213953>
- Kumar, K. S., Van Swygenhoven, H., & Suresh, S. (2003). Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys. *Acta Materialia*, 51(19), 5743–5774. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2003.08.032>
- Leszczynski, J., & Shukla, M. K. (2010). Practical aspects of computational chemistry: Methods, concepts and applications. In *Practical Aspects of Computational Chemistry: Methods, Concepts and Applications*. <https://doi.org/10.1007/978-90-481-2687-3>
- Manolis, G. D., Dineva, P. S., Rangelov, T., & Sfyris, D. (2021). Mechanical models and numerical simulations in nanomechanics: A review across the scales. *Engineering Analysis with*



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



- Boundary Elements*, 128(April), 149–170.  
<https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2021.04.004>
- Mendelev, M. I., Kramer, M. J., Becker, C. A., & Asta, M. (2008). Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu. *Philosophical Magazine*, 88(12), 1723–1750. <https://doi.org/10.1080/14786430802206482>
- Moseley, Philip., Oswald, Jay., & Belytschko, T. . (2012). Adaptive atomistic-to-continuum modeling of propagating defects. *INTERNATIONAL JOURNAL FOR NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING*, February. <https://doi.org/10.1002/nme>
- Plimpton, S. J. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117, 1–19. <https://doi.org/https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
- Shiari, B., & Miller, R. E. (2016). Multiscale modeling of crack initiation and propagation at the nanoscale. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 88, 35–49. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2015.12.003>
- Shilkrot, L. E., Miller, R. E., & Curtin, W. A. (2004). Multiscale plasticity modeling: Coupled atomistics and discrete dislocation mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52(4), 755–787. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2003.09.023>
- Stepanova, L., & Bronnikov, S. (2020). A computational study of the mixed–mode crack behavior by molecular dynamics method and the multi – Parameter crack field description of classical fracture mechanics. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 109(June), 102691. <https://doi.org/10.1016/j.tafmec.2020.102691>
- Templeton, J. A., Jones, R. E., & Wagner, G. J. (2010). Application of a field-based method to spatially varying thermal transport problems in molecular dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(8). <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/8/085007>
- Tsai, D. H. (1979). The virial theorem and stress calculation in molecular dynamics. *The Journal of Chemical Physics*, 70(3), 1375–1382. <https://doi.org/10.1063/1.437577>
- Van der Giessen, E., & Needleman, A. (1995). Discrete dislocation plasticity: A simple planar model. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 3(5), 689–735. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/3/5/008>
- Velilla Diaz, W. (2019). *Efecto de las fronteras de grano en la tenacidad a la fractura de materiales nano-cristalinos fisurados* [Tesis para el grado de Doctor en Ingeniería Mecánica, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia]. <https://manglar.uninorte.edu.co/bitstream/handle/10584/8601/136553.pdf?sequence=1&isAllowed=y>



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



- Velilla Díaz, W., & Palencia Díaz, A. (2015). Design Methodology for the Selection of the Best Alternative of Industrial Machine Maintenance for Time Reduction. *Inge CUC*, 11(2), 18–26. <https://doi.org/10.17981/ingecuc.11.2.2015.02>
- Velilla-Díaz, W., Pacheco-Sanjuan, A., & Zambrano, H. R. (2019a). The role of the grain boundary in the fracture toughness of aluminum bicrystal. *Computational Materials Science*, 167(March), 34–41. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.05.031>
- Velilla-Díaz, W., Pacheco-Sanjuan, A., & Zambrano, H. R. (2019b). The role of the grain boundary in the fracture toughness of aluminum bicrystal. *Computational Materials Science*, 167(March), 34–41. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.05.031>
- Velilla-Díaz, W., Ricardo, L., Palencia, A., & Zambrano, H. R. (2021). Fracture toughness estimation of single-crystal aluminum at nanoscale. *Nanomaterials*, 11(3), 1–11. <https://doi.org/10.3390/nano11030680>
- Velilla-Díaz, W., & Zambrano, H. R. (2021). *Crack Length Effect on the Fracture Behavior of Single-Crystals and Bi-Crystals of Aluminum. Figure 1*, 1–9.
- Wagner, G. J., Jones, R. E., Templeton, J. A., & Parks, M. L. (2008). An atomistic-to-continuum coupling method for heat transfer in solids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(41–42), 3351–3365. <https://doi.org/10.1016/j.cma.2008.02.004>
- Weinan, E., & Huang, Z. (2002). A dynamic atomistic-continuum method for the simulation of crystalline materials. *Journal of Computational Physics*, 182(1), 234–261. <https://doi.org/10.1006/jcph.2002.7164>
- Winey, J. M., Kubota, A., & Gupta, Y. M. (2010). Erratum: Thermodynamic approach to determine accurate potentials for molecular dynamics simulations: Thermoelastic response of aluminum (Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. (2009) 17 (055004)). In *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* (Vol. 18, Issue 2). <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/2/029801>
- Xiong, L., Deng, Q., Tucker, G., McDowell, D. L., & Chen, Y. (2012a). A concurrent scheme for passing dislocations from atomistic to continuum domains. *Acta Materialia*, 60(3), 899–913. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.11.002>
- Xiong, L., Deng, Q., Tucker, G., McDowell, D. L., & Chen, Y. (2012b). A concurrent scheme for passing dislocations from atomistic to continuum domains. *Acta Materialia*, 60(3), 899–913. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.11.002>



Universidad de Córdoba  
Facultad de ingenierías  
Departamento de Ingeniería Mecánica  
Maestría en Ingeniería Mecánica



- Xu, W., & Dávila, L. P. (2017a). Size dependence of elastic mechanical properties of nanocrystalline aluminum. *Materials Science and Engineering A*, 692(March), 90–94. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.03.065>
- Xu, W., & Dávila, L. P. (2017b). Size dependence of elastic mechanical properties of nanocrystalline aluminum. *Materials Science and Engineering A*, 692(February), 90–94. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.03.065>
- Xu, W., & Dávila, L. P. (2018). Tensile nanomechanics and the Hall-Petch effect in nanocrystalline aluminium. *Materials Science and Engineering A*, 710(October 2017), 413–418. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.10.021>
- Yamakov, V. I., Warner, D. H., Zamora, R. J., Saether, E., Curtin, W. A., & Glaessgen, E. H. (2014). Investigation of crack tip dislocation emission in aluminum using multiscale molecular dynamics simulation and continuum modeling. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 65(1), 35–53. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2013.12.009>
- Yamakov, V., Saether, E., & Glaessgen, E. H. (2008). Multiscale modeling of intergranular fracture in aluminum: Constitutive relation for interface debonding. *Journal of Materials Science*, 43(23–24), 7488–7494. <https://doi.org/10.1007/s10853-008-2823-7>
- Yue, S., Jing, Y., Sun, Y., Huang, R., Wang, Z., Zhao, J., & Aluru, N. R. (2022). Multi-scale simulation of anisotropic fracture behavior in BaZrO<sub>3</sub>. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 128(10), 1–12. <https://doi.org/10.1007/s00339-022-06023-9>
- Zimmerman, J. A., & Jones, R. E. (2013). The application of an atomistic J-integral to a ductile crack. *Journal of Physics Condensed Matter*, 25(15). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/15/155402>
- Zimmerman, J. A., Jones, R. E., & Templeton, J. A. (2010). A material frame approach for evaluating continuum variables in atomistic simulations. *Journal of Computational Physics*, 229(6), 2364–2389. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.11.039>
- Zimmerman, J. A., Webb, E. B., Hoyt, J. J., Jones, R. E., Klein, P. A., & Bammann, D. J. (2004). Calculation of stress in atomistic simulation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 12(4). <https://doi.org/10.1088/0965-0393/12/4/S03>
- Zimmerman, Jonathan., Jones, R. E., & Templeton, J. A. (2016). Principles of coarse-graining and coupling using the atom-to-continuum method. In *Springer Series in Materials Science* (Vol. 245). <https://doi.org/10.1007/978-3-319-33480-6>